

# Supporting Information: The Influence of Hydroxy Groups on the Adsorption of Three-Carbon Alcohols on Ni(111), Pd(111) and Pt(111) Surfaces: A Density Functional Theory Study within the D3 Dispersion Correction

Paulo C. D. Mendes,<sup>\*,†</sup> Rafael Costa-Amaral,<sup>\*,†</sup> Janaina F. Gomes,<sup>\*,‡</sup> and Juarez L. F. Da Silva<sup>\*,†</sup>

<sup>†</sup>*São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo, PO Box 780, 13560 – 970, São Carlos, SP, Brazil*

<sup>‡</sup>*Chemical Engineering Department, Federal University of São Carlos, PO Box 676, 13565-905, São Carlos, SP, Brazil*

E-mail: paulomendes@usp.br; rcamaral792@gmail.com; janainafg@ufscar.br; juarez\_dasilva@iqsc.usp.br

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

# I Effect of the Dispersion Correction on Bulk and Surface Properties

Table S1 shows our bulk and surface properties obtained from PBE and PBE+D3 calculations, which are discussed in the main article. Figure S1 shows the PBE and PBE+D3 energy and total magnetic moment with variations of the lattice parameter for fcc Pd.

**Table S1: Effect of the D3 van der Waals correction on some bulk and surface properties for Ni, Pd and Pt. Lattice parameter,  $a_0$ , cohesive energy per atom,  $E_{coh}$ , magnetic moment per atom,  $m_{at}$ , surface energy,  $\sigma$ , work function,  $\Phi$ , and interlayer relaxation between the two layers closer to the vacuum,  $\Delta d_{12}$ . The surface properties were calculated from 5 layer,  $1 \times 1$  slabs.**

Structure	Property	Ni		Pd		Pt	
		PBE	PBE+D3	PBE	PBE+D3	PBE	PBE+D3
	$a_0$ (Å)	3.52	3.48	3.94	3.88	3.97	3.92
fcc	$E_{coh}$ (eV)	-4.75	-5.10	-3.77	-4.35	-5.45	-6.22
	$m_{at}$ ( $\mu_B$ )	0.63	0.62	0.40	0.33	0.00	0.00
	$\sigma$ (eV)	0.64	0.88	0.56	0.87	0.65	1.04
(111)	$\Phi$ (eV)	5.05	5.08	5.20	5.21	5.68	5.68
	$\Delta d_{12}$ (%)	-1.07	0.00	0.02	1.25	0.95	1.93

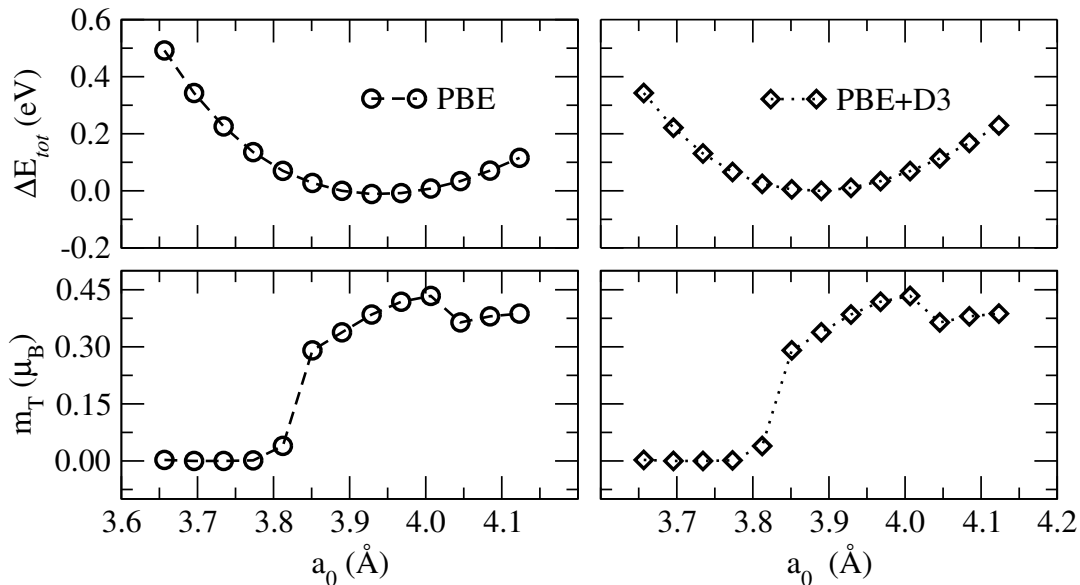


Figure S1: Profiles obtained with PBE and PBE+D3 for fcc Pd of the energy relative to the reference bulk ( $a_0 = 3.89$ ) and total magnetic moment as a function of the lattice parameter.

## II R-1,2-propanediol and S-1,2-propanediol Enantiomers

1,2-propanediol exists in two optical isomers (R- and S-). When obtaining our adsorption structures from the systems containing glycerol, the  $-OH$  farther away from the surface was

removed, resulting in different isomers depending on which hydroxy group was removed, see Figure S7. A comparison between some properties of gas-phase R- and S-1,2-propanediol is provided in Figure S2.

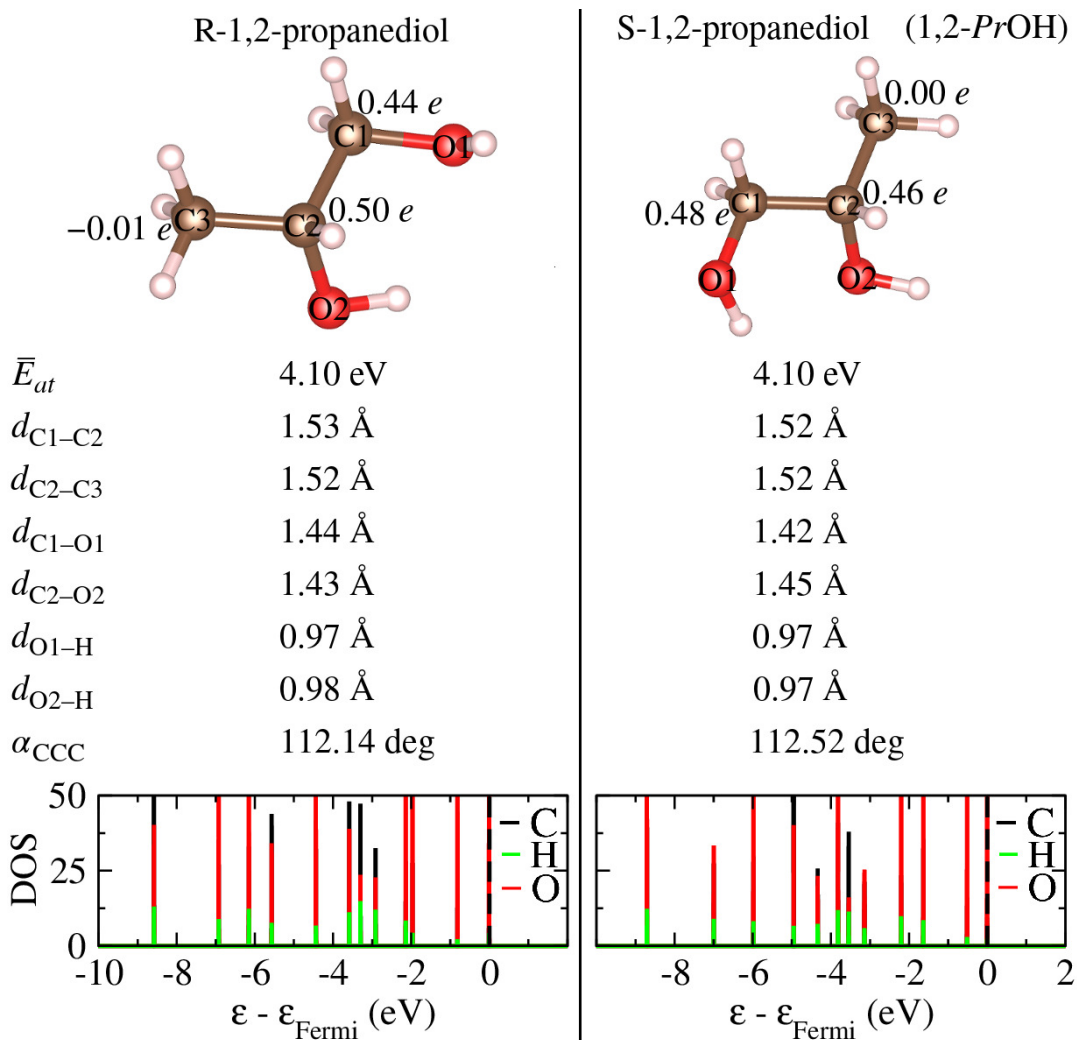


Figure S2: Gas-phase R-1,2-propanediol and S-1,2-propanediol with the effective charges indicated, in  $e$ , for each carbon atom, atomization energy per atom, bond distances, CCC angle and total local density of states per atom.

### III Complete Set of Relaxed Adsorption Structures

All adsorption structures evaluated for each adsorbate and substrate are shown in Figures S3-S8 ordered by energy relative to the lowest energy adsorption structure for each system,  $\Delta E_{tot}$ . The total magnetic moment,  $m_T$  (in  $\mu_B$ ), is included for all structures. For Ni(111) and Pd(111) adsorption structures,  $m_T$  closely followed the value for the clean surfaces,  $27.43 \mu_B$  for Pd(111) and  $53.63 \mu_B$  for Ni(111), with negligible contributions from the molecules. For Pt(111), up and down occupations are the same and  $m_{tot} = 0 \mu_B$  regardless of molecular orientation.

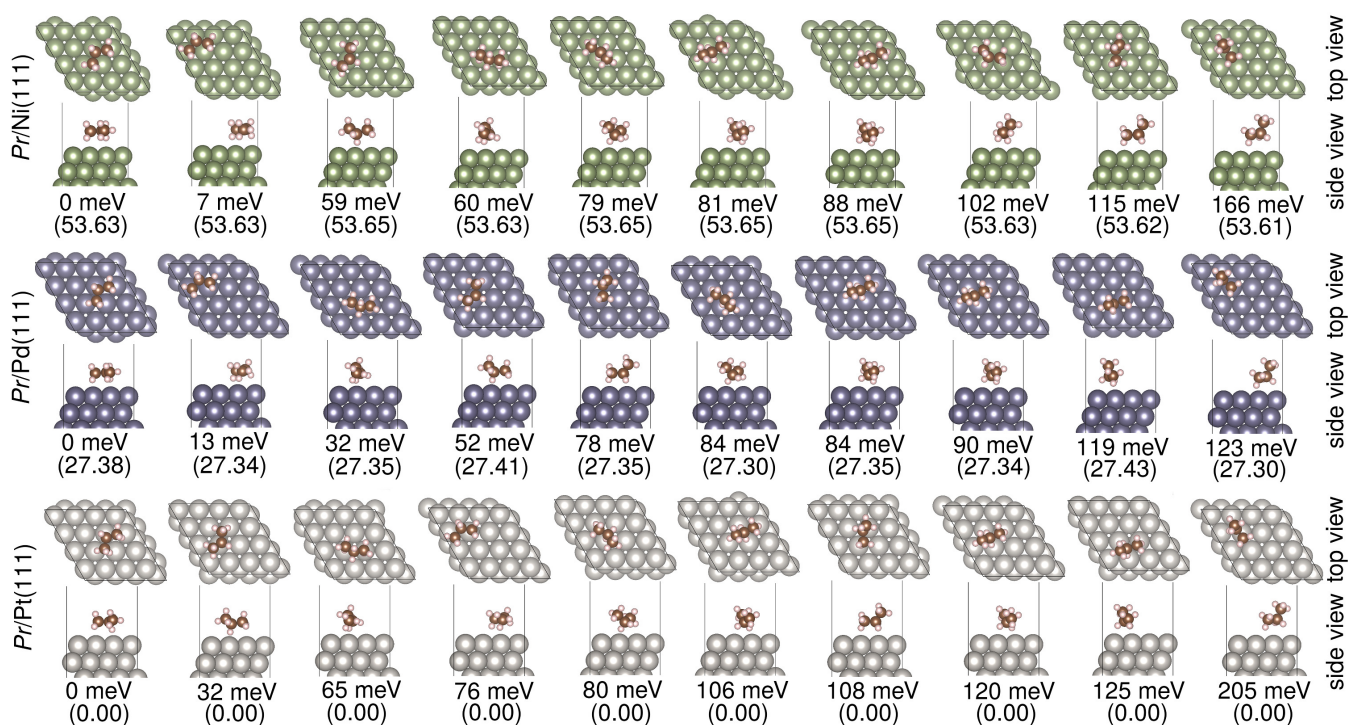


Figure S3: All propane (*Pr*) positions on Ni(111), Pd(111) and Pt(111) ordered by the energy relative to the lowest energy structure,  $\Delta E_{tot}$ . The total magnetic moment, in  $\mu_B$ , is indicated between parentheses.

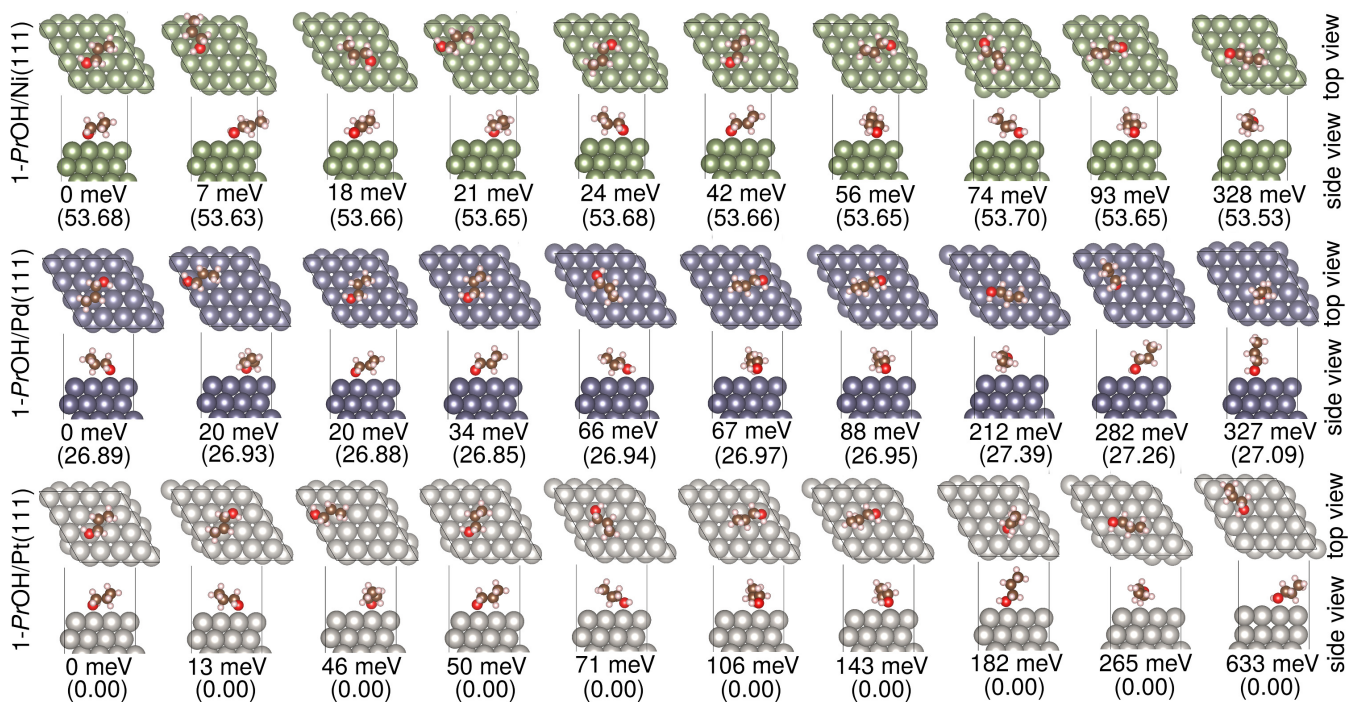


Figure S4: All 1-propanol (1-*PrOH*) positions on Ni(111), Pd(111) and Pt(111) ordered by the energy relative to the lowest energy structure,  $\Delta E_{tot}$ . The total magnetic moment, in  $\mu_B$ , is indicated between parentheses.

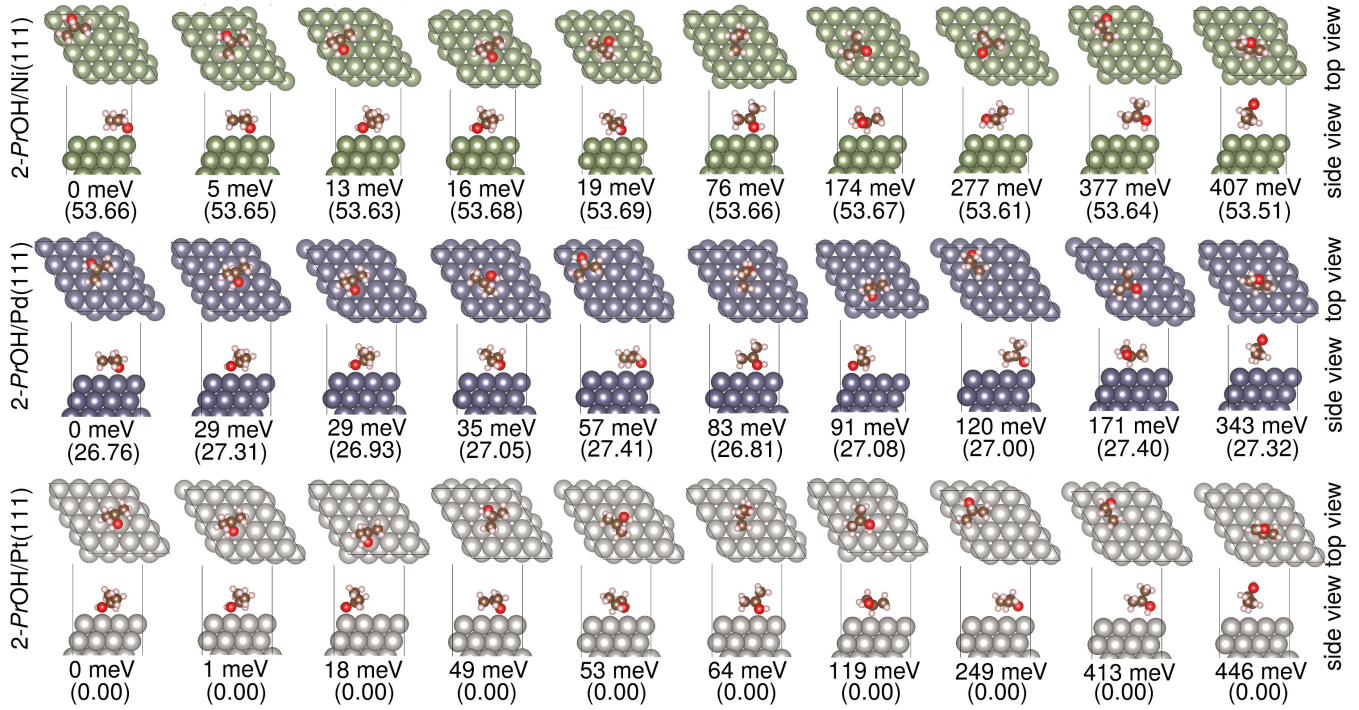


Figure S5: All 2-propanol (2-PrOH) positions on Ni(111), Pd(111) and Pt(111) ordered by the energy relative to the lowest energy structure,  $\Delta E_{tot}$ . The total magnetic moment, in  $\mu_B$ , is indicated between parentheses.

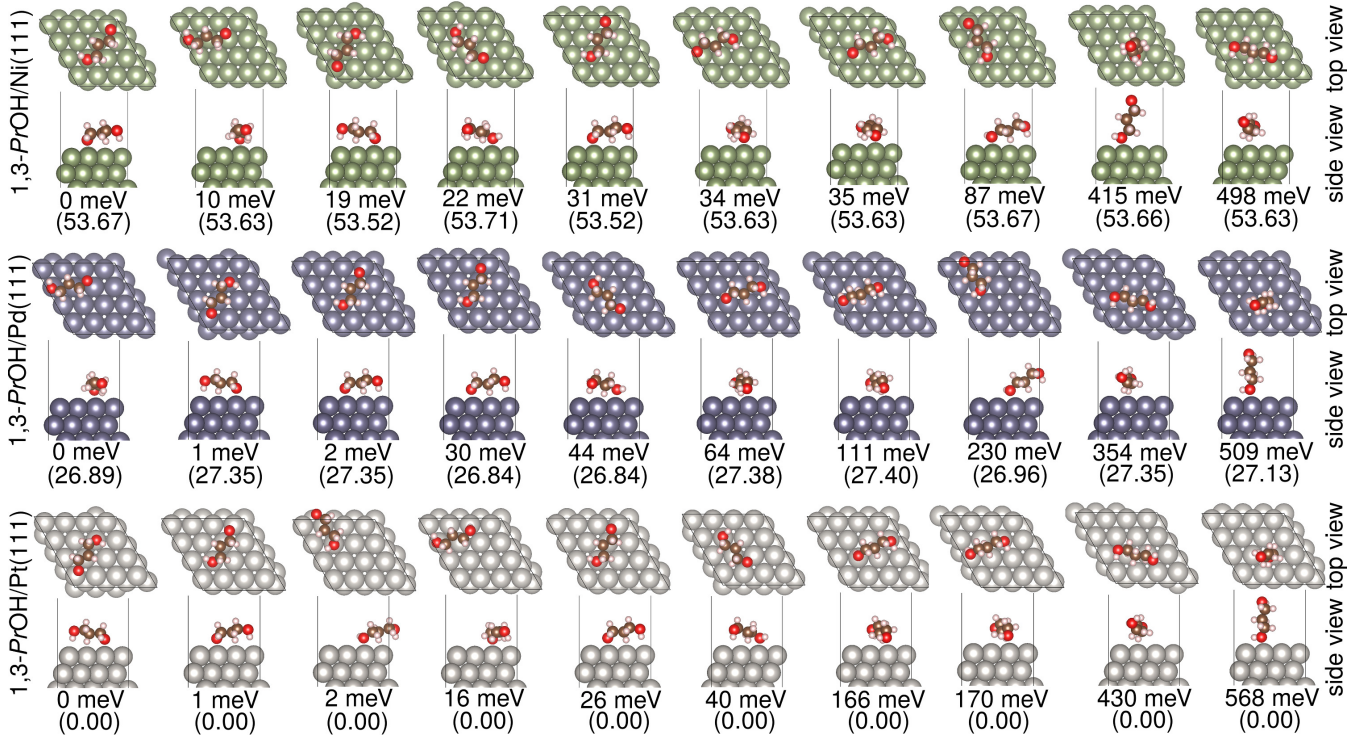
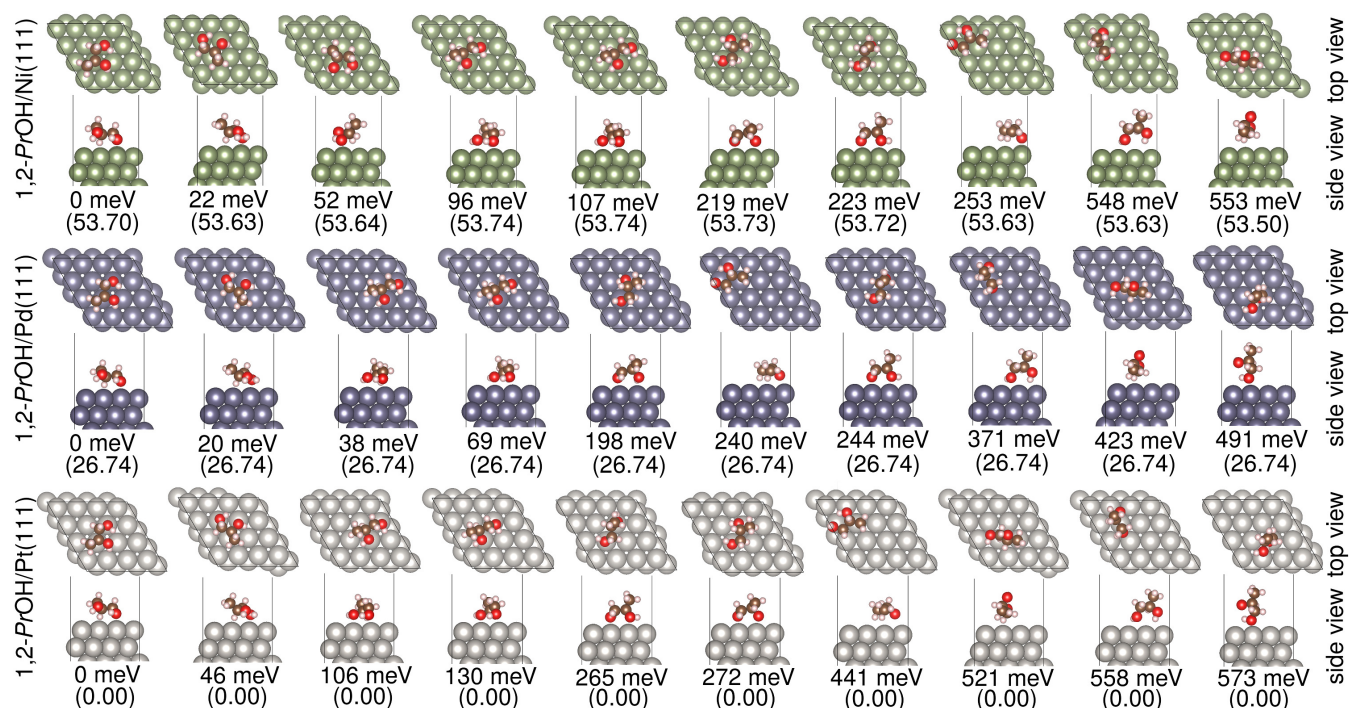


Figure S6: All 1,3-propanediol (1,3-PrOH) positions on Ni(111), Pd(111) and Pt(111) ordered by the energy relative to the lowest energy structure,  $\Delta E_{tot}$ . The total magnetic moment, in  $\mu_B$ , is indicated between parentheses.



\* 1,2-propanediol enantiomer present in each adsorption structure above following the energetic order

Ni(111): S-, S-, S-, S-, S-, R-, R-, R-, R-, R-

Pd(111): S-, S-, S-, S-, R-, R-, R-, R-, R-, S-

Pt(111): S-, S-, S-, S-, R-, R-, R-, R-, R-, S-

Figure S7: All 1,2-propanediol (1,2-PrOH) positions on Ni(111), Pd(111) and Pt(111) ordered by the energy relative to the lowest energy structure,  $\Delta E_{tot}$ . The total magnetic moment, in  $\mu_B$ , is indicated between parentheses. The enantiomer present in each adsorption structure are identified below the structures\*.

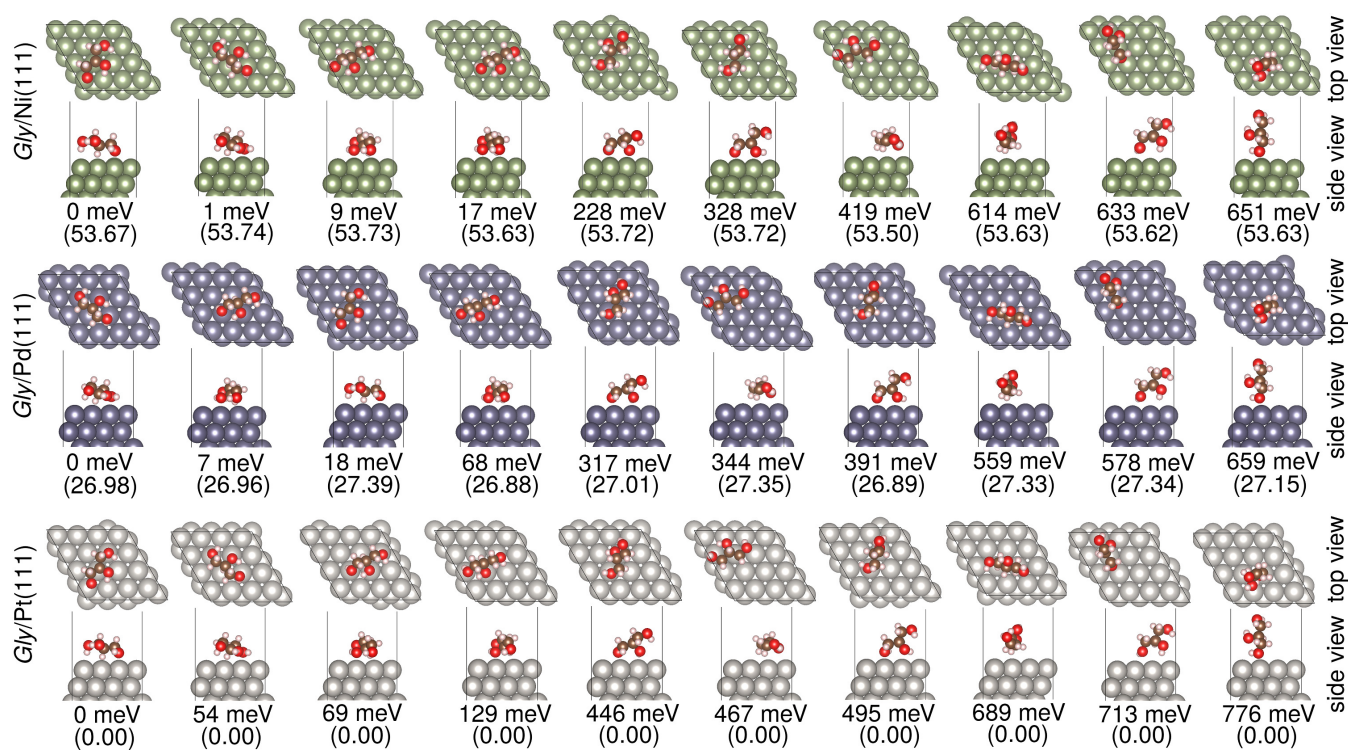


Figure S8: All glycerol (*Gly*) positions on Ni(111), Pd(111) and Pt(111) ordered by the energy relative to the lowest energy structure,  $\Delta E_{tot}$ . The total magnetic moment, in  $\mu_B$ , is indicated between parentheses.

## IV Additional Results for Geometric Properties

The perpendicular distance was calculated from each atom in the molecules to the plane defined by the average height ( $z$  axis) of the atoms of the first slab layer; the shortest values are shown in Table S2. Raw data for the shortest interatomic distances and the angle between the surface normal and the line connecting the terminal carbons is also provided in Table S2. The percentual variations in select bond lengths and in the carbon chain angle are in Figure S9; raw data is given in Table S3.

**Table S2: Structural parameters. Shortest distances, in Å, between C, O and H atoms and the nearest surface atom ( $d_{C-TM}$ ,  $d_{O-TM}$  and  $d_{H-TM}$ ) and perpendicular distances, in Å, between these atoms and the surface plane ( $d_{C-MT}^\perp$ ,  $d_{O-MT}^\perp$  e  $d_{H-MT}^\perp$ ) for the lowest energy configurations.  $\alpha_{CC\perp}$  is the angle, in degrees, between the line connecting the two terminal carbons and the surface normal.**

Molecule/Surface	$d_{C-TM}$	$d_{O-TM}$	$d_{H-TM}$	$d_{C-MT}^\perp$	$d_{O-MT}^\perp$	$d_{H-MT}^\perp$	$\alpha_{CC\perp}$
<i>Pr</i> /Ni(111)	3.34	-	2.39	3.23	-	2.36	87.80
<i>Pr</i> /Pd(111)	3.31	-	2.38	3.17	-	2.27	87.54
<i>Pr</i> /Pt(111)	3.23	-	2.16	3.18	-	2.15	85.21
1- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	3.10	2.11	2.14	3.00	2.25	2.12	75.92
1- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	3.21	2.35	2.12	3.16	2.39	2.08	74.59
1- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	3.25	2.27	2.22	3.09	2.30	2.18	72.71
2- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	3.29	2.12	2.47	3.25	2.27	2.32	89.25
2- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	3.41	2.34	2.46	3.24	2.34	2.28	86.85
2- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	3.24	2.29	2.24	2.95	2.31	2.14	77.88
1,3- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	3.10	2.11	2.11	3.03	2.25	2.07	81.92
1,3- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	3.22	2.35	2.32	3.09	2.39	2.05	83.73
1,3- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	3.19	2.29	2.15	3.11	2.34	2.04	80.00
1,2- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	2.98	2.11	1.92	2.93	2.26	1.87	72.16
1,2- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	3.09	2.33	1.97	3.00	2.38	1.92	74.76
1,2- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	3.09	2.28	1.97	3.00	2.33	1.91	73.45
<i>Gly</i> /Ni(111)	2.99	2.12	1.87	2.95	2.25	1.83	79.03
<i>Gly</i> /Pd(111)	3.09	2.63	1.98	2.86	2.48	1.87	81.56
<i>Gly</i> /Pt(111)	3.06	2.33	1.90	2.99	2.37	1.84	81.00



**Table S3: Structural perturbations due to adsorption. Percentual variations in molecular bond lengths,  $\Delta\text{C-C}$ ,  $\Delta\text{C-O}$ ,  $\Delta\text{O-H}$  and in the carbon chain angle,  $\Delta\text{CCC}$ , with respect to the gas-phase structure of the respective molecules. Numbering for C atoms follows the standard nomenclature order for alcohols with C1 as the carbon connected to the O atom closer to the surface; O atoms are labeled with the same number of its bonded C atom.**

Molecule/Surface	$\Delta\text{C1-C2}$	$\Delta\text{C2-C3}$	$\Delta\text{C1-O}$	$\Delta\text{C2-O}$	$\Delta\text{C3-O}$	$\Delta\text{O1-H}$	$\Delta\text{O2-H}$	$\Delta\text{O3-H}$	$\Delta\text{CCC}$
<i>Pr</i> /Ni(111)	-0.32	-0.28	-	-	-	-	-	-	0.38
<i>Pr</i> /Pd(111)	-0.31	-0.28	-	-	-	-	-	-	0.50
<i>Pr</i> /Pt(111)	-0.57	-0.50	-	-	-	-	-	-	1.18
1- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	-0.72	-0.33	1.71	-	-	0.55	-	-	-0.22
1- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	-0.63	-0.22	1.38	-	-	0.46	-	-	0.51
1- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	-0.89	-0.33	2.04	-	-	0.69	-	-	0.20
2- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	-0.45	-0.54	-	2.10	-	-	0.79	-	0.81
2- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	-0.37	-0.52	-	1.37	-	-	0.83	-	1.27
2- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	-0.38	-1.05	-	2.08	-	-	0.98	-	2.93
1,3- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	-0.65	0.26	1.94	-	-0.76	0.45	-	1.06	0.35
1,3- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	-0.59	0.27	1.57	-	-0.56	0.34	-	1.26	0.89
1,3- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	-0.89	0.24	2.22	-	-0.73	0.64	-	1.23	1.60
1,2- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	-0.17	-0.49	1.77	-0.82	-	1.25	1.45	-	1.12
1,2- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	-0.30	-0.44	1.46	-0.83	-	0.88	0.66	-	1.53
1,2- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	-0.48	-0.58	1.91	-1.19	-	1.36	0.86	-	1.82
<i>Gly</i> /Ni(111)	-0.92	0.01	1.96	-1.36	-0.74	0.66	0.23	1.29	3.04
<i>Gly</i> GLY/Pd(111)	-0.58	0.07	1.21	-0.36	-0.53	0.48	0.92	1.33	3.01
<i>Gly</i> GLY/Pt(111)	-0.92	0.15	1.97	-2.24	-1.01	0.67	0.58	1.65	3.58

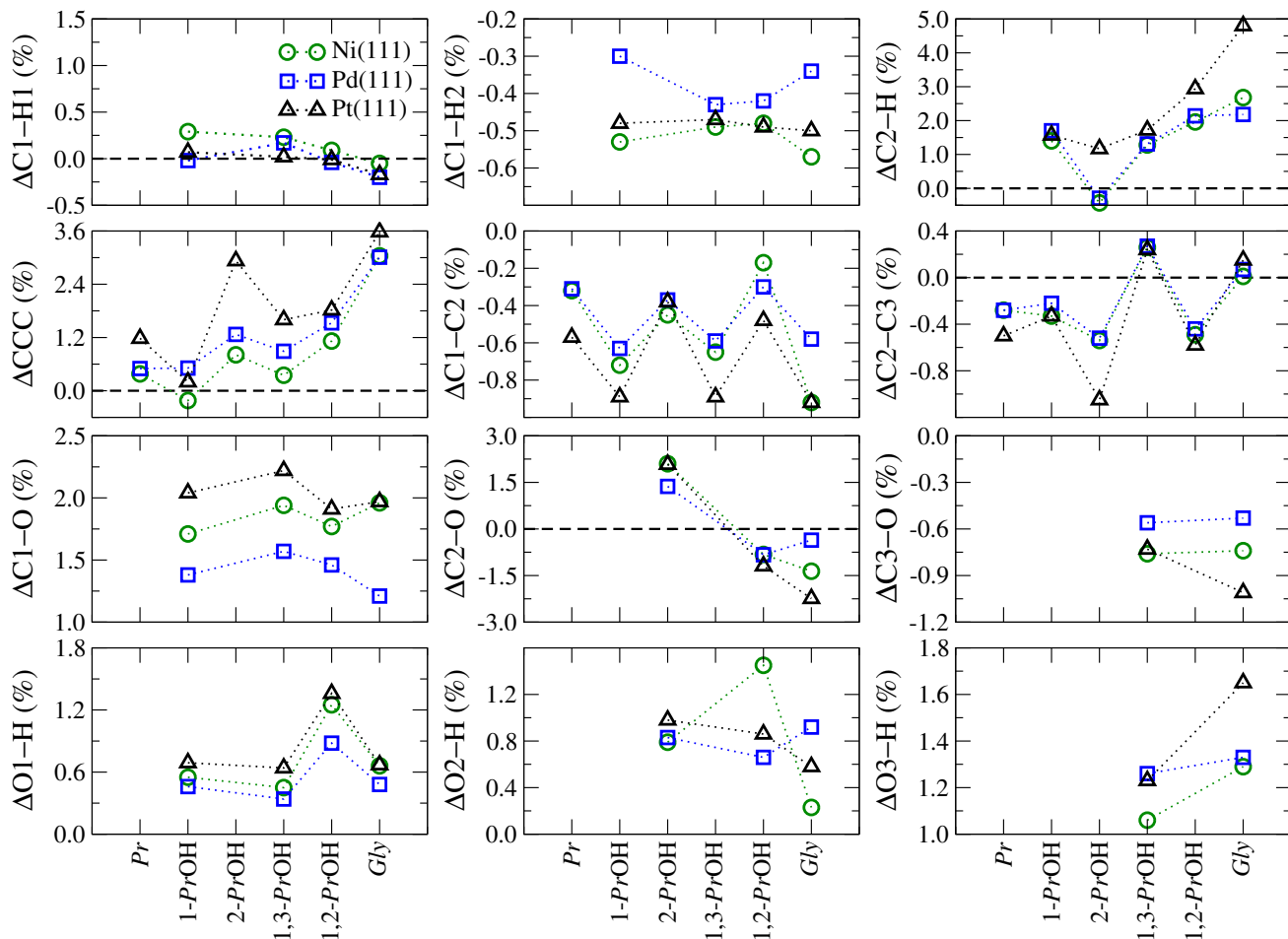


Figure S9: Percentual variations, due to adsorption, in the carbon chain angle,  $\Delta CCC$ , and molecular bond lengths,  $\Delta C - C$ ,  $\Delta C - H$ ,  $\Delta C - O$  and  $\Delta O - H$  with respect to the gas phase structure of each respective molecule. Positive and negative variations suggest weakening (stretching) and strengthening (contraction) of the bond, respectively. Numbering for C atoms follows the standard nomenclature order for alcohols with C1 as the carbon connected to the O atom closer to the surface; O atoms are labeled with the same number of its bonded C atom. C1 - H1 and C1 - H2 are the bonds between C1 and its bonded H atom closer and farther away from the surface, respectively, while C2 - H is the bond between the central C and its bonded H atom closer to the surface.

## V Additional Results from Bader Charge Analysis

Table S4 shows the effective charge,  $Q$ , for select atoms in both the gas-phase molecules and adsorption structures.

**Table S4: Bader charge analysis.** Effective charge,  $Q$  (in  $e$ ), for carbon,  $Q^C$ , the surface atom closer to the OH group,  $Q^{\text{Sur(O)}}$ , and average effective charges,  $\bar{Q}$  (in  $e$ ), for the remaining surface atoms  $\bar{Q}^{\text{Sur}}$ , oxygen,  $\bar{Q}^{\text{O}}$ , hydrogen bonded to C,  $\bar{Q}^{\text{H(C)}}$  and hydrogen bonded to O,  $\bar{Q}^{\text{H(O)}}$ . Carbon atoms are numbered according to the rules for naming alcohols, adopting C1 as the carbon connected to the OH group closer to the surface.  $Q^{\text{mol}}$  (in  $e$ ) is the total charge of the adsorbed molecule and  $\Delta\Phi$  (in eV) is the work function change due to adsorption.

Molecule/Surface	$Q^{\text{C1}}$	$Q^{\text{C2}}$	$Q^{\text{C3}}$	$Q^{\text{Sur(O)}}$	$\bar{Q}^{\text{Sur}}$	$\bar{Q}^{\text{O}}$	$\bar{Q}^{\text{H(C)}}$	$\bar{Q}^{\text{H(O)}}$	$Q^{\text{mol}}$	$\Delta\Phi$
<i>Pr</i> (gas)	0.03	0.04	0.03	-	-	-	-0.01	-	0.00	-
<i>Pr</i> /Ni(111)	-0.03	0.01	-0.03	-	-0.03	-	0.00	-	-0.03	-0.36
<i>Pr</i> /Pd(111)	-0.04	0.03	-0.01	-	-0.03	-	0.00	-	0.00	-0.34
<i>Pr</i> /Pt(111)	-0.01	0.02	-0.03	-	-0.05	-	0.01	-	0.04	-0.40
1- <i>Pr</i> OH (gas)	0.47	0.02	0.02	-	-	-1.08	0.00	0.57	0.00	-
1- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	0.40	0.00	0.01	0.15	-0.04	-1.09	0.01	0.60	0.02	-1.10
1- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	0.41	0.00	0.01	0.09	-0.04	-1.07	0.02	0.60	0.07	-0.84
1- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	0.41	0.00	-0.03	0.10	-0.06	-1.03	0.03	0.61	0.14	-0.98
2- <i>Pr</i> OH (gas)	-0.02	0.48	-0.02	-	-	-1.08	0.01	0.57	0.00	-
2- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	-0.04	0.41	-0.05	0.15	-0.04	-1.08	0.03	0.60	0.02	-1.15
2- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	-0.06	0.44	-0.03	0.09	-0.04	-1.06	0.03	0.59	0.06	-0.86
2- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	-0.04	0.40	-0.05	0.10	-0.06	-1.02	0.04	0.60	0.14	-0.93
1,3- <i>Pr</i> OH (gas)	0.47	0.00	0.47	-	-	-1.08	0.01	0.57	0.00	-
1,3- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	0.39	-0.01	0.47	0.15	-0.04	-1.08	0.02	0.58	-0.01	-0.62
1,3- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	0.41	-0.04	0.48	0.09	-0.04	-1.07	0.03	0.58	0.02	-0.47
1,3- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	0.37	-0.01	0.48	0.10	-0.06	-1.06	0.04	0.59	0.12	-0.61
1,2- <i>Pr</i> OH (gas)	0.48	0.46	0.00	-	-	-1.09	0.01	0.59	0.00	-
1,2- <i>Pr</i> OH/Ni(111)	0.40	0.47	-0.02	0.16	-0.04	-1.10	0.04	0.60	0.01	-0.64
1,2- <i>Pr</i> OH/Pd(111)	0.41	0.47	-0.02	0.10	-0.04	-1.09	0.03	0.61	0.08	-0.54
1,2- <i>Pr</i> OH/Pt(111)	0.39	0.47	-0.02	0.10	-0.07	-1.07	0.04	0.61	0.17	-0.75
<i>Gly</i> (gas)	0.48	0.47	0.44	-	-	-1.09	0.03	0.59	0.00	-
<i>Gly</i> /Ni(111)	0.39	0.48	0.45	0.15	-0.04	-1.10	0.04	0.60	0.02	-0.58
<i>Gly</i> /Pd(111)	0.43	0.45	0.46	0.04	-0.04	-1.08	0.05	0.60	0.07	-0.75
<i>Gly</i> /Pt(111)	0.39	0.50	0.47	0.09	-0.07	-1.08	0.05	0.61	0.19	-0.72

## VI PAW Projectors

Details about the PAW projectors employed in this study are listed in Table S5.

**Table S5: PAW–PBE projectors employed in this study, number of valence electrons ( $Z_{val}$ ), electronic configuration for valence electrons and default recommended cutoff energy for the planewave basis set (ENMAX).**

Element	PAW–PBE POTCAR	$Z_{val}$	valence	ENMAX (eV)
Ni	Ni_GW 31Mar2010	10	$3d^9 4s^1$	357.323
Pd	Pd_GW 06Mar2008	10	$4d^9 5s^1$	250.925
Pt	Pt_GW 10Mar2009	10	$5d^9 6s^1$	248.716
C	C_GW_new 19Mar2012	4	$2s^2 2p^2$	413.992
H	H_GW 21Apr2008	1	$1s^1$	300.000
O	O_GW 19Mar2012	6	$2s^2 2p^4$	434.431

## VII POSCAR Files for the Lowest Energy Adsorption Structures

Propane on Ni(111)

1.0000000000000000

9.8304644461624999 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9152322230812402 8.5134319413764192 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.0148388003470998

C H Ni

3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.4607170414480329 0.4300182498561854 0.3884220513046898 T T T

0.5827916497457636 0.6043131416716168 0.3902214748222666 T T T

0.7511221177847163 0.6357464426041212 0.3917866611070685 T T T

0.3406933145014234 0.4100183065643022 0.3846929577125010 T T T

0.4646585570389735 0.3673574255244527 0.4193784308796517 T T T

0.5600366997200855 0.6598769694999547 0.4199802184716189 T T T

0.4819251565721333 0.3731609043132781 0.3584435368893698 T T T

0.5685677580421863 0.6635260244001284 0.3593747025583248 T T T

0.7714369819069568 0.5804636707632479 0.4220162029092607 T T T

0.7765650875382115 0.5858421511907167 0.3608682062475335 T T T

0.8375040067177634 0.7621010105449004 0.3924792099447603 T T T

0.0825850226418486 0.1667224353799914 0.2769785478167173 T T T

0.3324975773636352 0.1664334539586538 0.2769446543962218 T T T

0.5826250185598251 0.1665977716540522 0.2771136086578688 T T T

0.8327437807099460 0.1667957983034482 0.2769884056786909 T T T

0.0825838019248162 0.4167221232788499 0.2768890790523026 T T T

0.3320604713762652 0.4164656059404944 0.2766662988266055 T T T

0.5825619736821904 0.4161146950414458 0.2766222233913603 T T T

0.8327372884038602 0.4165589134522837 0.2769658778131516 T T T

0.0827781333495543 0.6666939999783581 0.2770106472826730 T T T

0.3324198023442909 0.6667216747446471 0.2769647802260405 T T T

0.5822639516885826 0.6670967645686244 0.2770225226774807 T T T

0.8329163667129449 0.6666967798199974 0.2770393078896495 T T T

0.0827390028299031 0.9168238753372708 0.2771029288835745 T T T  
0.3326395002785661 0.9167292290372209 0.2771639019956898 T T T  
0.5825562398326748 0.9169140000452627 0.2770976631855429 T T T  
0.8327760763472259 0.9170257672791391 0.2770106972615532 T T T  
0.1660114492608064 0.0833791538963610 0.2078432119052695 T T T  
0.4161571297554422 0.0834040574806694 0.2078966500426495 T T T  
0.6661742781795732 0.0833920761034919 0.2078647555994258 T T T  
0.9160545124926438 0.0833638805815678 0.2077821520835216 T T T  
0.1660100996807078 0.3333098880321182 0.2077225344290343 T T T  
0.4160729868477780 0.3333748090395990 0.2076819002980820 T T T  
0.6661693836294353 0.3333700646293682 0.2078277739854748 T T T  
0.9161127487911979 0.3333623730215002 0.2077454481305842 T T T  
0.1660725967880368 0.5833516428290391 0.2077566509932521 T T T  
0.4161538656804012 0.5834448084855757 0.2077683788598239 T T T  
0.6660502346704765 0.5835629686429009 0.2078759607286793 T T T  
0.9160272011937203 0.5833700886541042 0.2078297177257589 T T T  
0.1660531386129776 0.8334135409130773 0.2079511401695923 T T T  
0.4161460505248180 0.8334194215808343 0.2079023803555661 T T T  
0.6661445847706251 0.8334734470984370 0.2079253875312451 T T T  
0.9159786344585232 0.8333178783524706 0.2079365413347334 T T T  
0.9996310007326979 -0.0000330016641266 0.1385490082211615 T T T  
0.2496285969239918 0.0000012978918333 0.1385172177273420 T T T  
0.4995879915738178 0.0000381776927006 0.1385407679055914 T T T  
0.7495576829402191 0.0000034045283827 0.1385152971971163 T T T  
0.9996360773456513 0.2500528598501350 0.1384371167860250 T T T  
0.2496140154767138 0.2499934244586565 0.1384436349860050 T T T  
0.4996422761033463 0.2500079938195182 0.1384640699716758 T T T  
0.7495348629655190 0.2500351084834312 0.1385000203724444 T T T  
0.9996315974313849 0.5001104442495966 0.1384440074788560 T T T  
0.2496398881593636 0.5000698573785594 0.1384066254765965 T T T  
0.4996521082209278 0.5000769618050266 0.1384650266806705 T T T  
0.7495914154702501 0.5001073522431249 0.1385127524561733 T T T  
0.9996177130558880 0.7500677361660512 0.1385401885858320 T T T  
0.2496308585652862 0.7501409538944021 0.1385186950285208 T T T  
0.4996290948643610 0.7500769569780639 0.1385161305179424 T T T  
0.7495940717932791 0.7500996467327938 0.1385743050138090 T T T  
0.0830863666116444 0.1665907637681304 0.0691376701356311 T T T  
0.3331429873968367 0.1666443764701747 0.0691644572640883 T T T  
0.5831597400418080 0.1666411537367246 0.0691387444320934 T T T  
0.8331042498632764 0.1666476254359572 0.0691780016096582 T T T  
0.0831080450925933 0.4166633801779062 0.0691239747166504 T T T  
0.3331754144405644 0.4166701368059291 0.0691224043158726 T T T  
0.5831597764032561 0.4166573932706212 0.0691841098717344 T T T  
0.8331003006843999 0.4166734468153082 0.0691494560472939 T T T  
0.0831438242960488 0.6667298112272113 0.0691405153940663 T T T  
0.3331825245400886 0.6667584568971219 0.0691723699955069 T T T  
0.5832208122892030 0.6667665025818804 0.0691936674656611 T T T  
0.8331483803783863 0.6667321260995037 0.0692491726031656 T T T  
0.0831646911542856 0.9166968427185158 0.0692006598752183 T T T

0.3331797812058967 0.9167118188764293 0.0691503806317528 T T T  
0.5831514549605371 0.9167259965025953 0.0691962743493202 T T T  
0.8331478952805571 0.9166813996083645 0.0692116725713820 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

Propane on Pd(111)

1.0000000000000000  
10.9793534407452995 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-5.4896767203726604 9.5083989968135203 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.9577965581524985

C H Pd

3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.4819611973247438 0.4497057079877787 0.4066069621919907 T T T  
0.5782073451407282 0.6086360981926763 0.4089928553744427 T T T  
0.7339583872161828 0.6536983422759239 0.4102535694920115 T T T  
0.3703128897742233 0.4195470271572957 0.4044403969435966 T T T  
0.4955151244233081 0.3960838540252521 0.4356148202334206 T T T  
0.5506169541266017 0.6508766493428865 0.4382868267238743 T T T  
0.5061316269651083 0.4064390938425817 0.3764489087737771 T T T  
0.5576613191242249 0.6579958091307847 0.3795057796149799 T T T  
0.7586594606095591 0.6048989747421845 0.4382910769019721 T T T  
0.7645402643818279 0.6202946894950317 0.3791948008392869 T T T  
0.8012039017869836 0.7683581756683796 0.4128589478291763 T T T  
0.0809004065857194 0.1665075022368879 0.3006690379033251 T T T  
0.3306958585836507 0.1661896151615378 0.3005039879889245 T T T  
0.5810290392479952 0.1663590914754968 0.3007203945807204 T T T  
0.8310967617430394 0.1666766306012464 0.3006747531173179 T T T  
0.0809047509974323 0.4166356127895933 0.3006507483993847 T T T  
0.3300831710526692 0.4162946465590413 0.3001220064975780 T T T  
0.5806855135471405 0.4159239733066844 0.3006006011866388 T T T  
0.8311668922116564 0.4164322573242588 0.3007624954270132 T T T  
0.0812456940313777 0.6666634253000665 0.3007783147495659 T T T

0.3307318195235733 0.6667420487081863 0.3006653320493242 T T T  
0.5804537939590639 0.6673593656111900 0.3004797782368014 T T T  
0.8311854417899150 0.6665911934117044 0.3009921522058570 T T T  
0.0811343469855892 0.9166789982040543 0.3007469918810403 T T T  
0.3310486110069532 0.9166345376094902 0.3007394286669516 T T T  
0.5810832905730027 0.9170133302284790 0.3007380087208727 T T T  
0.8312548336976837 0.9170444482970919 0.3006706640569037 T T T  
0.1645296468695587 0.0832939726459598 0.2248230844231092 T T T  
0.4147517768740261 0.0833493737210921 0.2248737749458804 T T T  
0.6647807491813376 0.0834629021051383 0.2248565950276348 T T T  
0.9146360785348411 0.0833361782219243 0.2248244078234853 T T T  
0.1644545180871488 0.3332183477678658 0.2247169179282485 T T T  
0.4147006237889054 0.3333056619299979 0.2246815848666908 T T T  
0.6646767282546575 0.3333307226415667 0.2249542912661865 T T T  
0.9146112548776294 0.3334214898634739 0.2248438086550123 T T T  
0.1646196694360851 0.5833250634709379 0.2248601619964782 T T T  
0.4146206743385152 0.5834628809955134 0.2247300688940089 T T T  
0.6646141508664491 0.5834233016148724 0.2250142747435271 T T T  
0.9146399807417979 0.5833920473462049 0.2250494160779082 T T T  
0.1646656652373994 0.8333479708652021 0.2249621767006758 T T T  
0.4147493148808100 0.8334638657647959 0.2249162358322910 T T T  
0.6647610244661764 0.8335628303693632 0.2248704292194803 T T T  
0.9145456824393562 0.8331803076842775 0.2250202602621480 T T T  
0.9984777913385704 0.9998685970607866 0.1503268281244466 T T T  
0.2485816597372641 0.0000057066903299 0.1503011256345287 T T T  
0.4985018342214415 0.0000078408935796 0.1503070638957086 T T T  
0.7484496993244536 -0.0000287513372432 0.1502929746380336 T T T  
0.9985203116981716 0.2500759868185001 0.1503031961110886 T T T  
0.2485151186302421 0.2499448710975066 0.1502181753016053 T T T  
0.4985902533370454 0.2499803351793551 0.1502897844006935 T T T  
0.7484732138977267 0.2501523368082986 0.1503208968891861 T T T  
0.9985462363202938 0.5002528546917315 0.1503331148836292 T T T  
0.2485932636021682 0.5001467284051856 0.1502296275589860 T T T  
0.4986749607308091 0.5001234259525454 0.1502878849023933 T T T  
0.7485404028056558 0.5001588186381010 0.1504381804964520 T T T  
0.9985982548697908 0.7501086550528215 0.1504080612323697 T T T  
0.2485878179859605 0.7501357726023444 0.1503248098511610 T T T  
0.4985257965781116 0.7500842236887306 0.1503061340230150 T T T  
0.7485687901405793 0.7500012384857321 0.1503851477262496 T T T  
0.0825207840073320 0.1666808541976504 0.0757351895156802 T T T  
0.3326182425282522 0.1667272221804672 0.0757258280907605 T T T  
0.5826923672848782 0.1667617490723175 0.0757565874294297 T T T  
0.8326132920609461 0.1667207259562597 0.0757498853802472 T T T  
0.0825246683138294 0.4166286854195419 0.0757381766745693 T T T  
0.3325930993514757 0.4166884249604850 0.0757214327414717 T T T  
0.5826598753064545 0.4167576330519251 0.0757712612149552 T T T  
0.8325885010271911 0.4166974631333312 0.0757934216341010 T T T  
0.0825320492634923 0.6666497433723968 0.0757757387523909 T T T  
0.3326145582745463 0.6666734705562348 0.0757380566826751 T T T

0.5826395964244150 0.6666942021311646 0.0757699507644993 T T T  
0.8325457704673302 0.6667171018681326 0.0758061323772074 T T T  
0.0824895151481379 0.9166834872214857 0.0757695838006863 T T T  
0.3326384196226190 0.9167225534455605 0.0757435786140173 T T T  
0.5826761008930031 0.9167381973715203 0.0757538782753965 T T T  
0.8325885087993427 0.9167055602446035 0.0757734435564796 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666714 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666714 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

Propane on Pt(111)

1.0000000000000000  
11.0749925591741007 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-5.5374962795870397 9.5912249029683796 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.0362929569318986

C H Pt

3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.4636653654326491 0.4490107189288285 0.4107861682635300 T T T  
0.5619310809799474 0.6056924489720837 0.4087184021275620 T T T  
0.7137001486539231 0.6503980753878613 0.4178737319948737 T T T  
0.3565607863537368 0.4199548429187744 0.4011428345785783 T T T  
0.4599325022079441 0.4081891514033059 0.4445132350468717 T T T  
0.5257499170649619 0.6603103992930694 0.4309474738625803 T T T  
0.4983051899804541 0.3938308114964413 0.3880184006607944 T T T  
0.5548523961317363 0.6435595472280338 0.3743461887036305 T T T  
0.7263388751860016 0.6162680487842941 0.4511252152974912 T T T  
0.7523859557093472 0.6034266687916137 0.3933408157171601 T T T  
0.7812258593657464 0.7642127932246879 0.4158465202816734 T T T  
0.0794921174305238 0.1650107609264462 0.3028057475459582 T T T  
0.3294204527922405 0.1648142512957207 0.3026940110866043 T T T  
0.5796372930193290 0.1651180678688584 0.3028368479650968 T T T  
0.8296904821904773 0.1652312142765623 0.3028631493772512 T T T  
0.0794114626791964 0.4151270446134928 0.3028069112638068 T T T  
0.3284359876535766 0.4143132122015157 0.3020914040388066 T T T



0.5796084763153214 0.4143406107930946 0.3022864661962017 T T T  
0.8296739659222953 0.4151782366426447 0.3028708617906513 T T T  
0.0795796634838839 0.6651891139811320 0.3028662075396785 T T T  
0.3289570076123726 0.6652881318425888 0.3026985919027632 T T T  
0.5790678115807208 0.6654925667016626 0.3029533133729218 T T T  
0.8300148036120659 0.6651937855836639 0.3027040144578296 T T T  
0.0796273033231113 0.9151267347085433 0.3029295964393993 T T T  
0.3295286647887201 0.9152681075217126 0.3028817702098067 T T T  
0.5796013282874263 0.9157482724988115 0.3028980881468133 T T T  
0.8300131210848665 0.9155554476372870 0.3029145459010103 T T T  
0.1641517579915509 0.0822828123526240 0.2259662535112033 T T T  
0.4143662777828817 0.0823335795352461 0.2259884478609946 T T T  
0.6643014236370264 0.0823110480681775 0.2260010092931767 T T T  
0.9140830503355585 0.0822523252559811 0.2260066965496267 T T T  
0.1638079444930056 0.3321527332168719 0.2257708776427096 T T T  
0.4141474824167673 0.3321398352821753 0.2257319621141653 T T T  
0.6644880821859415 0.3322253817269404 0.2258504478358370 T T T  
0.9141482271195658 0.3322782699548700 0.2260290033722492 T T T  
0.1641325222311462 0.5822720579448012 0.2259400309311417 T T T  
0.4141733624277514 0.5823967971170928 0.2259543297997594 T T T  
0.6641351357748675 0.5823921858935397 0.2260774355519636 T T T  
0.9142693880493723 0.5822451432574015 0.2259874392423503 T T T  
0.1642433357286483 0.8323266234514528 0.2260541928919755 T T T  
0.4142699901018838 0.8324916013898632 0.2260598536105256 T T T  
0.6642174087142868 0.8323439001607769 0.2262494480673296 T T T  
0.9143511230816547 0.8324002640781217 0.2260754964762421 T T T  
0.9985574086401972 0.9993761473233098 0.1514057279345640 T T T  
0.2486184531499373 0.9994776490099666 0.1513780517186688 T T T  
0.4985217727345358 0.9994643510686764 0.1513833976042049 T T T  
0.7482870418535172 0.9990395741048120 0.1514444419242376 T T T  
0.9984671756340627 0.2494439118196929 0.1513515711374643 T T T  
0.2485502662674766 0.2494059934367803 0.1512814121703941 T T T  
0.4986018187056571 0.2493676173005003 0.1513004874913980 T T T  
0.7485376722361743 0.2494458947314230 0.1513741345383940 T T T  
0.9985244463692827 0.4994948744758345 0.1513814574615322 T T T  
0.2488415983940240 0.4996694443189159 0.1512850628767515 T T T  
0.4986462994775712 0.4995028680686393 0.1513364717635323 T T T  
0.7485377938658661 0.4996392070137756 0.1513657769021249 T T T  
0.9987171444957091 0.7495526188347066 0.1513915786603684 T T T  
0.2485788074294840 0.7495549532062106 0.1513751123719043 T T T  
0.4985030411116599 0.7495036981391839 0.1514679676879084 T T T  
0.7486182241224625 0.7494559873161304 0.1514717905103877 T T T  
0.0824006830297513 0.1663426262271889 0.0767865073197299 T T T  
0.3324824705652820 0.1663460817327973 0.0767513233280218 T T T  
0.5825006387931347 0.1663366184964937 0.0767825988943297 T T T  
0.8324429261272949 0.1663881328629514 0.0768217519497248 T T T  
0.0823420883967050 0.4163186917992785 0.0767823452399761 T T T  
0.3324519575006671 0.4164074284212813 0.0767273017994624 T T T  
0.5825740364074755 0.4164247470629510 0.0767375144151100 T T T

0.8325628257144039 0.4163522505861649 0.0768053895001549 T T T  
0.0824801178519863 0.6664146747065441 0.0767748932867945 T T T  
0.3325206675174455 0.6664671895093145 0.0767635450998363 T T T  
0.5825164433230826 0.6664536171197436 0.0768122868427428 T T T  
0.8325621001937660 0.6664630288072423 0.0767831322506228 T T T  
0.0825429156226805 0.9164489369729579 0.0767799203127560 T T T  
0.3324938504140224 0.9164730966386594 0.0767896622499582 T T T  
0.5824903551126117 0.9164671732244895 0.0768121328175486 T T T  
0.8325107941161054 0.9164979632528415 0.0768054796947465 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

1-propanol on Ni(111)

1.0000000000000000  
9.8304644461624999 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-4.9152322230812402 8.5134319413764192 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.0148388003470998

C O H Ni

3 1 8 80

Selective dynamics

Direct

0.4636146203821554 0.4449557122529565 0.3805353368183689 T T T  
0.5753310280498619 0.6201119844952009 0.3847794228089906 T T T  
0.7371059655927457 0.6571337579399974 0.4016656020666082 T T T  
0.3220416174574620 0.4053511987581463 0.3544148822239278 T T T  
0.2805791792969185 0.4729927415784597 0.3638693819878885 T T T  
0.4276286936519986 0.3878914730789700 0.4145512131048509 T T T  
0.5244436914491438 0.6740502860525494 0.4071630433829260 T T T  
0.5188238179959442 0.3884573082507930 0.3611712201574354 T T T  
0.5879512713835421 0.6741493682606250 0.3500315787043125 T T T  
0.7307090912805905 0.6013900955484744 0.4351089308633434 T T T  
0.7917077998001191 0.6147109741811729 0.3765469310332889 T T T  
0.8153421950795040 0.7842951582256187 0.4054508624599907 T T T  
0.0808845357019361 0.1629303065238262 0.2766156286128428 T T T  
0.3323621649012816 0.1626333886621398 0.2764412607352456 T T T

0.5828292686248472 0.1647375124676844 0.2768242955285151 T T T  
0.8324866734204200 0.1648307609149054 0.2768476494618605 T T T  
0.0807841825343172 0.4153649213434725 0.2763905852413422 T T T  
0.3322239803636483 0.4143601608179776 0.2816645392369397 T T T  
0.5847391655663441 0.4146325173447907 0.2758622983265097 T T T  
0.8325417577852844 0.4147711077853181 0.2769932087022868 T T T  
0.0823573283275847 0.6648323906085808 0.2771004331950189 T T T  
0.3319348526412687 0.6662334991264016 0.2763996470510167 T T T  
0.5842172412173778 0.6662177621643923 0.2762086457542745 T T T  
0.8333120321406857 0.6650115161761939 0.2767879333221338 T T T  
0.0822728253932497 0.9142438020152459 0.2769615275103161 T T T  
0.3326751751327968 0.9146361811196196 0.2769779765194304 T T T  
0.5825528763249023 0.9149581817157073 0.2767053139704149 T T T  
0.8326772062047400 0.9148042871347827 0.2767846930192122 T T T  
0.1659302595097749 0.0816867031971018 0.2077239753117165 T T T  
0.4162843037980592 0.0820307298635043 0.2076005622023776 T T T  
0.6661981005190800 0.0817784638757471 0.2075855148220696 T T T  
0.9161847115027245 0.0820836652269483 0.2075675441374067 T T T  
0.1674041699582309 0.3325627459083863 0.2087406166532620 T T T  
0.4151726909039625 0.3325576096900048 0.2086367878349305 T T T  
0.6661020485266672 0.3316958553839984 0.2074234528234611 T T T  
0.9160088223507212 0.3315817389630461 0.2075154485902019 T T T  
0.1659155890285889 0.5818306841245687 0.2075964276147837 T T T  
0.4151305322657463 0.5803363099009804 0.2085960849229133 T T T  
0.6662781161305427 0.5820165242245132 0.2074618651489600 T T T  
0.9160308090500396 0.5815834087198409 0.2076941468771826 T T T  
0.1661887213683939 0.8318500771880691 0.2078075651120121 T T T  
0.4162235763560516 0.8317427700965353 0.2075087323649039 T T T  
0.6658843201647622 0.8317817581332473 0.2075097379997721 T T T  
0.9160223491539357 0.8318395248815975 0.2076499565458180 T T T  
0.9997222160528356 -0.0010214859324747 0.1383924313797252 T T T  
0.2495158535478605 -0.0011151879394125 0.1384579840997834 T T T  
0.4995139769938917 0.9989610981431536 0.1384108782968691 T T T  
0.7496486308341314 0.9987915414622771 0.1383992313272286 T T T  
-0.0000440514346165 0.2490342710969796 0.1384921298241338 T T T  
0.2496457334468030 0.2491038916698828 0.1387205046970611 T T T  
0.4993522324609166 0.2490580962748030 0.1384550486034843 T T T  
0.7495894700708360 0.2489146921181986 0.1383721515940754 T T T  
0.9996599954524159 0.4989375036125426 0.1383874578793782 T T T  
0.2497148746139947 0.4986410531599670 0.1386880150798095 T T T  
0.4992753878828541 0.4987420024281223 0.1386800808459382 T T T  
0.7495720454057190 0.4989222684200953 0.1383151425570064 T T T  
0.9996642107479883 0.7488944250871132 0.1383845606440737 T T T  
0.2495675208131382 0.7488483384836224 0.1383821520882669 T T T  
0.4994088848341171 0.7485043961744910 0.1384521965548579 T T T  
0.7496292490970772 0.7488941819288272 0.1383117298471912 T T T  
0.0832496742303409 0.1661925152990926 0.0691726026839091 T T T  
0.3330066846041641 0.1661358345837536 0.0692319307939809 T T T  
0.5830321287746723 0.1661689106842562 0.0691471412891900 T T T

0.8333290471766064 0.1661773485906610 0.0691922717360307 T T T  
0.0832592141514264 0.4160802918477635 0.0691886462859186 T T T  
0.3330707918989926 0.4160202512542496 0.0692388795409623 T T T  
0.5829751537591339 0.4161230272178131 0.0691581411471131 T T T  
0.8331080024897378 0.4160452014637763 0.0690768921720368 T T T  
0.0831231011644621 0.6659653995349266 0.0690850814768215 T T T  
0.3330302951344113 0.6658762573515059 0.0691980712755974 T T T  
0.5830004683969664 0.6659029039956345 0.0691657453815220 T T T  
0.8331406039842628 0.6660965154307866 0.0691013613629875 T T T  
0.0831855044315773 0.9161289523434968 0.0691137530982980 T T T  
0.3331105165066736 0.9160666217380570 0.0691127319613674 T T T  
0.5830220998546785 0.9158841357286166 0.0691705015222356 T T T  
0.8331476829135820 0.9161538952807845 0.0690799555020599 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

1-propanol on Pd(111)

1.0000000000000000  
10.9793534407452995 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-5.4896767203726702 9.5083989882009199 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.0648899984884004

C O H Pd

3 1 8 80

Selective dynamics

Direct

0.2363976394544986 0.3886709561471761 0.4287532944138552 T T T  
0.3767351855780299 0.4465462573122753 0.4045569998377235 T T T  
0.4640040840891949 0.6056575369983696 0.4063646173891870 T T T  
0.5901737136706601 0.6647407639315506 0.3792200366958272 T T T  
0.1742820593697409 0.2737754944033726 0.4254566392901801 T T T  
0.1737811792787345 0.4322353085832058 0.4145663823448467 T T T  
0.3559565043677893 0.4140880978097820 0.3687649716082694 T T T  
0.2510989684335124 0.4141476708717942 0.4644660730804387 T T T  
0.4375778429112456 0.3991430471208454 0.4175891447592155 T T T  
0.4039827245483915 0.6537316654500873 0.3934034629831334 T T T

0.4955378212912554 0.6422944302164064 0.4409066901886557 T T T  
0.6408839638057929 0.6146653731301256 0.3853922684856376 T T T  
0.0825656586661089 0.1655082084932509 0.2995033115805802 T T T  
0.3327807885011299 0.1651994765531824 0.2994678459372050 T T T  
0.5830051581886152 0.1659560171715555 0.2995060400850395 T T T  
0.8330694001009157 0.1661591328560258 0.2995804246033943 T T T  
0.0824900296115260 0.4157763522096212 0.2995558079880181 T T T  
0.3316789861134478 0.4143105270347424 0.2988981816141857 T T T  
0.5832981429294170 0.4147359176495108 0.2993334038399458 T T T  
0.8330432405013861 0.4158290948914435 0.2995867302821568 T T T  
0.0828236206887008 0.6657725598739340 0.2995897370364597 T T T  
0.3315034872782103 0.6660833899350708 0.2992821104238926 T T T  
0.5826682268128833 0.6658957959067984 0.3012113601186695 T T T  
0.8341113299544934 0.6658159416322516 0.2995004835930776 T T T  
0.0830861184681388 0.9158643513568192 0.2996719986747645 T T T  
0.3327810210962494 0.9159924819518021 0.2996153631706184 T T T  
0.5827808925205836 0.9169157586017129 0.2995951019776920 T T T  
0.8338717963762934 0.9167585525477963 0.2996424843315617 T T T  
0.1663767644095965 0.0827617307269523 0.2240397629363239 T T T  
0.4165062158904809 0.0828040345979385 0.2239847511648077 T T T  
0.6664326705983956 0.0825698928359263 0.2240493662755766 T T T  
0.9161754677395835 0.0825718096979431 0.2240702009286700 T T T  
0.1664643541040331 0.3328827060087906 0.2239172134712229 T T T  
0.4164231225454464 0.3325527390608145 0.2238883941043640 T T T  
0.6665168134074805 0.3328136808587387 0.2239449547123726 T T T  
0.9163388014643599 0.3326278190558170 0.2239907890930820 T T T  
0.1663421817400868 0.5826194133337943 0.2239631286298278 T T T  
0.4170759668935021 0.5832109686951615 0.2243812471604926 T T T  
0.6660961164221298 0.5830646694905350 0.2245795345631632 T T T  
0.9162768740283627 0.5826268812963498 0.2239946433121171 T T T  
0.1663840240472260 0.8327408265975260 0.2240710583428286 T T T  
0.4164394313199635 0.8329231249420614 0.2241390445619188 T T T  
0.6658930536061458 0.8318428033597605 0.2247692926831965 T T T  
0.9164634032534426 0.8328789591432503 0.2242328837536771 T T T  
0.9998265744495454 0.9995609901250843 0.1498114800041322 T T T  
0.2498450043876310 0.9996460367266923 0.1497409435163656 T T T  
0.4998580942674672 0.9995931453371361 0.1497852291659037 T T T  
0.7497322160127372 0.9993027675171954 0.1499263010967164 T T T  
0.9998134252864760 0.2495173720244050 0.1497511155453639 T T T  
0.2498549621672049 0.2496224407084644 0.1496951858795556 T T T  
0.4999084187755601 0.2495957139935069 0.1496793132098268 T T T  
0.7498496926737734 0.2495163582539452 0.1497638478932692 T T T  
0.9998564873407896 0.4996028556600069 0.1497406805994785 T T T  
0.2500440812175740 0.4997411410786874 0.1497486181743988 T T T  
0.5000012134072673 0.4998562928435759 0.1499271000711404 T T T  
0.7497880465362537 0.4997182327004484 0.1498148246922359 T T T  
0.9998246510579404 0.7496888547092555 0.1498402948276827 T T T  
0.2499185314953942 0.7497033355411520 0.1497964405606875 T T T  
0.5000550277511667 0.7497111732659699 0.1499662131137977 T T T

0.7496922091842725 0.7495692345023542 0.1500655368332517 T T T  
0.0832057545623966 0.1664548721993436 0.0755107239443299 T T T  
0.3332566237617641 0.1664264505497598 0.0754698232778675 T T T  
0.5833513376975877 0.1664870285482148 0.0754895234620118 T T T  
0.8332157887442193 0.1663234972100791 0.0754644501309947 T T T  
0.0833302890998277 0.4164745120080511 0.0754491745144326 T T T  
0.3333769375161451 0.4165584626660956 0.0755127465411855 T T T  
0.5832847236389658 0.4165579442828671 0.0755408392485895 T T T  
0.8332044193640659 0.4164886009707398 0.0754598542391810 T T T  
0.0832376630671779 0.6664393546643449 0.0755309186889816 T T T  
0.3333729164615427 0.6665385694576901 0.0755495054483234 T T T  
0.5833125143134507 0.6665038827209144 0.0755894303058176 T T T  
0.8332227790668167 0.6665215861424082 0.0755835099666393 T T T  
0.0832304575860984 0.9164331468662663 0.0755140572427945 T T T  
0.3332891159456927 0.9164661386571759 0.0755114870575485 T T T  
0.5833102416751237 0.9164011012543545 0.0755614645819007 T T T  
0.8331604219640197 0.9163611679135660 0.0755961789463093 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666714 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

1-propanol on Pt(111)

1.0000000000000000  
11.0749925591741007 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-5.5374962795870397 9.5912249029683796 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.0362929569318986

C O H Pt

3 1 8 80

Selective dynamics

Direct

0.4431726810686511 0.4483177075620784 0.4057048105566210 T T T  
0.5311499424869947 0.6051245696972856 0.4096090498007230 T T T  
0.6728781832552360 0.6513549489525760 0.4306805868809735 T T T  
0.3166702704305456 0.4024155732731452 0.3793739317511949 T T T  
0.2770382494405393 0.4620525482913030 0.3858939916169050 T T T  
0.4098597329502196 0.3978078177201851 0.4385614810467605 T T T

0.4737262051449690 0.647099998335019 0.4279178174936487 T T T  
0.5000093692185943 0.4040243624923559 0.3884383352228275 T T T  
0.5476959091576855 0.6502254036729254 0.3753156220499494 T T T  
0.6626490923956764 0.6052552477457548 0.4639160279799528 T T T  
0.7342157957812143 0.6205068621730138 0.4096069434793458 T T T  
0.7324313603931656 0.7652635197570612 0.4342204704307204 T T T  
0.0791183932341045 0.1613126232853396 0.3024899446307481 T T T  
0.3309550865747006 0.1612154170089846 0.3025729723876830 T T T  
0.5813681895824047 0.1634182894141799 0.3027712577094648 T T T  
0.8309067712302022 0.1636034821725191 0.3027120837970282 T T T  
0.0793512411096926 0.4139676327975351 0.3027445501418012 T T T  
0.3307453537475800 0.4125528135725774 0.3039324224105391 T T T  
0.5833930270361676 0.4133754515513599 0.3024595590108792 T T T  
0.8311879167097320 0.4134963160995780 0.3029209162465349 T T T  
0.0808202148425402 0.6638394729695516 0.3032351504417227 T T T  
0.3304978526564001 0.6653469794547835 0.3027565609613406 T T T  
0.5831844609674546 0.6658628776006777 0.3021614658740641 T T T  
0.8317994162429997 0.6637969516362636 0.3032074046381801 T T T  
0.0807868868018862 0.9129016941328315 0.3031188177053246 T T T  
0.3311746662702654 0.9134882494500260 0.3028349184940147 T T T  
0.5811620118726616 0.9142140138923547 0.3027211446637248 T T T  
0.8313210329588795 0.9138711089959752 0.3028474955085897 T T T  
0.1652024683227571 0.0812048445729352 0.2260445778158473 T T T  
0.4157458085006935 0.0817162427065970 0.2256892628191689 T T T  
0.6655224991348879 0.0817628428274370 0.2257690791976510 T T T  
0.9152520093962117 0.0818246222412906 0.2256469667871618 T T T  
0.1656101537957135 0.3319587618045221 0.2268440451458595 T T T  
0.4151186149611373 0.3319643957932049 0.2269564894841097 T T T  
0.6656631849178202 0.3313881531580861 0.2256034316674973 T T T  
0.9152839346471553 0.3315323114550081 0.2256638069280118 T T T  
0.1650406197009643 0.5818880803902493 0.2260856063765214 T T T  
0.4147771214643327 0.5811818059924788 0.2268028395094147 T T T  
0.6658473779143469 0.5818069556658548 0.2260545503047649 T T T  
0.9154017381992897 0.5815531818444053 0.2260271013757127 T T T  
0.1654785345209182 0.8316604225843391 0.2260153021959052 T T T  
0.4156542121909577 0.8318921707690055 0.2257265329645190 T T T  
0.6654360077828461 0.8319973929223389 0.2256943598389878 T T T  
0.9153468522624041 0.8316850493518170 0.2260405186028756 T T T  
0.9994551452137984 0.9991042333651431 0.1513050269782440 T T T  
0.2492116772667152 0.9991377731455665 0.1513094972364863 T T T  
0.4993251706492583 0.9993454040717460 0.1511792535077197 T T T  
0.7493292726136607 0.9991045301182002 0.1512318987430275 T T T  
0.0005393639716914 0.2497443688610275 0.1512548038715649 T T T  
0.2494316802795504 0.2493872904694353 0.1518175041706581 T T T  
0.4986499143991976 0.2498728367765896 0.1513422929910274 T T T  
0.7492555006013566 0.2491221417674055 0.1511144209862252 T T T  
0.9992681445003374 0.4992643200869948 0.1512855785704753 T T T  
0.2493356124365374 0.4991028354118366 0.1517833336998603 T T T  
0.4990759079441051 0.4990709148071454 0.1518170145129039 T T T

0.7493522116144354 0.4994301502709404 0.1513154279841385 T T T  
0.9993923664016818 0.7492033644320418 0.1513492429198210 T T T  
0.2492347689784631 0.7491963081797812 0.1513151288280995 T T T  
0.4987050049957052 0.7480875333970434 0.1513637821208280 T T T  
0.7494462927355900 0.7491681209318516 0.1513281053198119 T T T  
0.0831004518670060 0.1663524511899457 0.0767688448166347 T T T  
0.3330759970680817 0.1663901678288245 0.0767821652004778 T T T  
0.5831039730425610 0.1662041225658576 0.0766120712480240 T T T  
0.8328824117608357 0.1662697279577190 0.0766445138331416 T T T  
0.0830574569402689 0.4163005728688919 0.0767656481512034 T T T  
0.3329961691653555 0.4163454670367027 0.0770154931642101 T T T  
0.5829315692643875 0.4163124831962534 0.0767936141031030 T T T  
0.8330481470604809 0.4162706085056821 0.0766951720968157 T T T  
0.08304922268013088 0.6663483603135955 0.0767040552899922 T T T  
0.3330832020285473 0.6663042304535614 0.0767882699752511 T T T  
0.5830105606750838 0.6663015743472267 0.0768352280334268 T T T  
0.8330430270081332 0.6663135327093019 0.0767034538486436 T T T  
0.0830476383586549 0.9163029724343216 0.0766815395066784 T T T  
0.3330316690167006 0.9163184617293401 0.0767021156093290 T T T  
0.5831007409537049 0.9164330504651016 0.0767136593325792 T T T  
0.8330381401259548 0.9163434205249380 0.0767208702525817 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

2-propanol on Ni(111)

1.0000000000000000  
9.8304644461624697 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-4.9152322230812402 8.5134319413764192 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.0209177057371015

C O H Ni

3 1 8 80

Selective dynamics

Direct

0.1414150737385883 0.6768551294822590 0.3900190013251333 T T T  
0.3033780885736491 0.8220694890324574 0.3922280721539811 T T T



0.4359529159430290 0.7862886589414662 0.3888755052256591 T T T  
0.3264040892616065 0.9332493196879764 0.3550151721098178 T T T  
0.0474970031192170 0.7067131681272424 0.3904442733122641 T T T  
0.1237374942018182 0.5992391867339629 0.4194617383340067 T T T  
0.3156286516813033 0.8872558373801792 0.4243967708101846 T T T  
0.1287469609290790 0.6098028540202971 0.3581171254156829 T T T  
0.2438082836835184 0.9610910964833592 0.3568844031169080 T T T  
0.4325522505867695 0.7146912075860848 0.4184245505461407 T T T  
0.4248141725302035 0.7189098244238701 0.3571505645082349 T T T  
0.5508726574957967 0.8945365372675179 0.3879455668367624 T T T  
0.0824698754272732 0.1647049939345387 0.2770232101912583 T T T  
0.3319720728903356 0.1661581148153206 0.2763307917077262 T T T  
0.5841433414475977 0.1658632046758086 0.2766958997948284 T T T  
0.8330665756607537 0.1649573790031131 0.2769477288584952 T T T  
0.0821980918833907 0.4138976020493399 0.2767356662889897 T T T  
0.3325345426625354 0.4144243073163722 0.2768432542741809 T T T  
0.5825146445468484 0.4146965316055301 0.2767766935734706 T T T  
0.8324213297236611 0.4145908330935893 0.2768341991327213 T T T  
0.0809265179354603 0.6628528068607638 0.2762245670001813 T T T  
0.3322243063207977 0.6622447144363891 0.2760647257475425 T T T  
0.5827712670375055 0.6644178852803142 0.2765965788644116 T T T  
0.8325403914078465 0.6648896511862211 0.2767483555025589 T T T  
0.0808286036636479 0.9151539695382981 0.2761112265359961 T T T  
0.3326561085391539 0.9129802296990381 0.2822726509705104 T T T  
0.5847542505792060 0.9149873750832762 0.2763556172143509 T T T  
0.8327315021624955 0.9146130324325069 0.2769092099859967 T T T  
0.1660037858826653 0.0819571703365477 0.2075293991659261 T T T  
0.4151438935149453 0.0800458287191959 0.2088820117014989 T T T  
0.6661532292502147 0.0819200133147057 0.2076962352573272 T T T  
0.9160120665019780 0.0816825576689912 0.2077158211140848 T T T  
0.1661915763434680 0.3318535392145369 0.2076701993939424 T T T  
0.4162263673195351 0.3317050755052025 0.2074634177470993 T T T  
0.6656588533290643 0.3315246259849901 0.2076518211114730 T T T  
0.9158843075919130 0.3318183199992206 0.2076562304040808 T T T  
0.1658689070232535 0.5815586857627831 0.2074352126111448 T T T  
0.4161550476231043 0.5818975592508832 0.2074257244084581 T T T  
0.6660367531577798 0.5816470235683682 0.2075452928778054 T T T  
0.9161039218542807 0.5819687944318600 0.2075036428841180 T T T  
0.1674395004409320 0.8324840305944584 0.2085952380403669 T T T  
0.4152068380181578 0.8325617754030799 0.2087160077377286 T T T  
0.6658653765246300 0.8317560433274610 0.2075532449745913 T T T  
0.9158999341149615 0.8315034713963898 0.2073697613579561 T T T  
0.9996054280300878 0.9990334253525452 0.1383297258423321 T T T  
0.2497546740801339 0.9987592800280279 0.1386867993504462 T T T  
0.4992514697469944 0.9987957851533124 0.1387594601172165 T T T  
0.7494620838772004 0.9989610246619718 0.1383575548723144 T T T  
0.9995209951847751 0.2489263348011896 0.1383426670155226 T T T  
0.2495412097104114 0.2489390509089678 0.1383123124865076 T T T  
0.4993357858806304 0.2484335102263303 0.1385248154651169 T T T

0.7494627265301396 0.2488001092885094 0.1383889452271743 T T T  
0.9996173732610535 0.4989793343648516 0.1383078420525037 T T T  
0.2494998395173888 0.4989078985800481 0.1382560512000377 T T T  
0.4994862114091063 0.4989692778909715 0.1383332715602136 T T T  
0.7495149367668664 0.4987896282363326 0.1384101668111603 T T T  
0.9999751831595118 0.7491454279970959 0.1384197032383970 T T T  
0.2497974468991676 0.7492573572944828 0.1386252741424002 T T T  
0.4993440255712363 0.7491827809388178 0.1384202743106555 T T T  
0.7494342598790378 0.7490037102169547 0.1383202221373575 T T T  
0.0831060620831601 0.1660768479301876 0.0690785435028207 T T T  
0.3330670586180882 0.1659428520213856 0.0692111363160765 T T T  
0.5829575474207568 0.1659382453119230 0.0691954894231631 T T T  
0.8330162006648615 0.1661022006866890 0.0691197284468534 T T T  
0.0830621351578927 0.4161112449381021 0.0690657033034595 T T T  
0.3331228058585645 0.4160914217136101 0.0690523827612804 T T T  
0.5830284304948110 0.4158547138562860 0.0691687396320195 T T T  
0.8330081883037809 0.4160825073381842 0.0690990279963528 T T T  
0.0832524026332779 0.6662286376734619 0.0691591593620351 T T T  
0.3330228362833706 0.6662412695152579 0.0691766102184692 T T T  
0.5830100666771839 0.6661719076085572 0.0691324978865605 T T T  
0.8332796932308021 0.6661659933227670 0.0692091962938149 T T T  
0.0832968015511702 0.9161900022986468 0.0691604751589032 T T T  
0.3331203882146361 0.9161560399800465 0.0692408661739153 T T T  
0.5829758073493240 0.9162245072300201 0.0691783892349634 T T T  
0.8330699639511427 0.9161103879146354 0.0690775086119522 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

2-propanol on Pd(111)

1.0000000000000000

10.9793534407452995 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.4896767203726604 9.5083989968135203 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.9577965581524985

C O H Pd

3 1 8 80

## Selective dynamics

### Direct

0.4762887504164061 0.4476557468973911 0.4083877170202613 T T T  
0.5726206009652612 0.6051234359659190 0.4137647508720971 T T T  
0.7277520399902763 0.6514617832993617 0.4130564371452795 T T T  
0.5501779597813222 0.6833978234409851 0.3783978887385595 T T T  
0.3651227217289153 0.4197455758590778 0.4063982337574390 T T T  
0.4876526991509745 0.3902551503802120 0.4366578660815528 T T T  
0.5473867060489741 0.6398336926788420 0.4453496844094680 T T T  
0.5019799474157031 0.4100866798255471 0.3773612430879216 T T T  
0.4496222860921412 0.6520374742605274 0.3765954396557238 T T T  
0.7536979818209588 0.6009487144525325 0.4401623546696853 T T T  
0.7555422330339145 0.6211392462183065 0.3810049632873076 T T T  
0.7924066965243557 0.7660463824486129 0.4166388032668928 T T T  
0.0811126114758180 0.1669598311991091 0.3003444971256604 T T T  
0.3308470915401333 0.1665258682895561 0.3003128070128491 T T T  
0.5810704175616709 0.1667841444608567 0.3003023977015941 T T T  
0.8312447638024243 0.1671865705387655 0.3003402872152293 T T T  
0.0807635663323244 0.4168535121656480 0.3004014410564264 T T T  
0.3296579152616563 0.4160003510437155 0.2998598660615395 T T T  
0.5810548057778184 0.4154849677094848 0.3002050057839401 T T T  
0.8312007702833962 0.4166574079008242 0.3004483890876130 T T T  
0.0810488667321844 0.6668176248396078 0.3003878298494547 T T T  
0.3290026899359743 0.6668756589880014 0.2997349307259566 T T T  
0.5814792882180831 0.6670923390603104 0.3018723451772594 T T T  
0.8323605228828749 0.6668496921310123 0.3004811760489098 T T T  
0.0813961700885242 0.9170707406432519 0.3004658179062405 T T T  
0.3309256677641750 0.9169978097657586 0.3004205384851651 T T T  
0.5809583819293029 0.9180976654912940 0.3000836679909312 T T T  
0.8322164337152683 0.9180654407798324 0.3002566664798431 T T T  
0.1648525102266059 0.0835249474454706 0.2245897124831120 T T T  
0.4149478596509309 0.0835748565442752 0.2245788984491796 T T T  
0.6650317734421058 0.0834773582123986 0.2245178493684094 T T T  
0.9147693761490131 0.0833588144885745 0.2245723318165332 T T T  
0.1648464007037344 0.3336173261449106 0.2244719568277279 T T T  
0.4148578447318907 0.3333901610451331 0.2245412958818892 T T T  
0.6649058499076524 0.3337528174603691 0.2246031545750093 T T T  
0.9147439328751699 0.3334933412802740 0.2245757375682320 T T T  
0.1644056079595137 0.5831781655610394 0.2243329991328187 T T T  
0.4154010468328390 0.5838592506298312 0.2248785033942391 T T T  
0.6643880092048501 0.5841131833350542 0.2252735481979935 T T T  
0.9145082560372009 0.5835150410155416 0.2246694452901498 T T T  
0.1648376560915592 0.8334420582610622 0.2246300462521254 T T T  
0.4149114285161966 0.8337749717797180 0.2245376915387662 T T T  
0.6645429317717139 0.8327825524194609 0.2250872377097842 T T T  
0.9150080972811346 0.8335460624278926 0.2247572903385230 T T T  
0.9987888850649632 0.0000378353829204 0.1501406221235959 T T T  
0.2488685295602636 0.0001042448573072 0.1500824636382757 T T T  
0.4988859198557509 0.0001760576141122 0.1500682116870195 T T T

0.7487039553810148 0.9999047814582825 0.1501631823258341 T T T  
0.9986543603190217 0.2500271326675305 0.1501248182360678 T T T  
0.2488030271216637 0.2500622043441302 0.1500766196871384 T T T  
0.4988655314259429 0.2501147164755829 0.1500958936244570 T T T  
0.7486937069352205 0.2500968375501339 0.1501152625140277 T T T  
0.9984527670213773 0.5000204054747674 0.1500654538636963 T T T  
0.2488381752004297 0.5001377259141131 0.1500551590838879 T T T  
0.4988988350772288 0.5003029365777465 0.1503013252020487 T T T  
0.7485440924084918 0.5002786889981853 0.1502506195662855 T T T  
0.9987519979498688 0.7501222638009506 0.1501831218477794 T T T  
0.2488298987869294 0.7501731120163504 0.1500926469790659 T T T  
0.4989329565795989 0.7501181377017134 0.1502711741398040 T T T  
0.7486485524013982 0.7500660730414556 0.1503743659689118 T T T  
0.0826554543140674 0.1667452685020692 0.0756577079084854 T T T  
0.3327060635813175 0.1667075963584036 0.0756409475845421 T T T  
0.5828006651698696 0.1667626798794222 0.0756281480917631 T T T  
0.8326753271820252 0.1666175823723191 0.0755978363158982 T T T  
0.0827610776609233 0.4167212402328617 0.0755912529721357 T T T  
0.3328387274431879 0.4167688741687715 0.0756755815888276 T T T  
0.5827157158694599 0.4167677731180147 0.0757052434076436 T T T  
0.8325958384125939 0.4167273097426137 0.0756102392503070 T T T  
0.0826591340120995 0.6666295978988941 0.0756613159326382 T T T  
0.3328036537111489 0.6667610869673731 0.0756756091413694 T T T  
0.5827434139344392 0.6667136017809150 0.0757453217726512 T T T  
0.8326790142084785 0.6667188048877996 0.0757337887653289 T T T  
0.0826991589275917 0.9166898442340413 0.0756655661020982 T T T  
0.3327277560419673 0.9167208766568139 0.0756376583185826 T T T  
0.5827225968093833 0.9166356506781722 0.0756735199267747 T T T  
0.8326705510906229 0.9166037745180262 0.0757017382099591 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666714 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666714 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

2-propanol on Pt(111)

1.0000000000000000

11.0749925591741007 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5374962795870299 9.5912248942807192 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.1435935803432002

C O H Pt

3 1 8 80

Selective dynamics

Direct

0.4821346852088034 0.5231749871663970 0.4339735173698884 T T T  
0.5927638013991186 0.5522403788750935 0.3994470143701760 T T T  
0.7411810658583852 0.6228871848065708 0.4161205817246031 T T T  
0.5640065401850265 0.4204769320349234 0.3785328966177040 T T T  
0.3779023024944716 0.4744233794731252 0.4186076988262918 T T T  
0.5018794265903159 0.6219013490971883 0.4489414387028980 T T T  
0.5847589986122442 0.6181475403523558 0.3726243618556987 T T T  
0.4823709049397096 0.4550073887411258 0.4604977878567574 T T T  
0.4625914626330187 0.3581377471485549 0.3779440409373966 T T T  
0.7707784799616637 0.7269089267570346 0.4289298544661403 T T T  
0.7538865586609661 0.5615917791704552 0.4425062848550743 T T T  
0.8131430663919427 0.6365078906216375 0.3887498137279468 T T T  
0.0869013897890690 0.1700905985315236 0.3015922509593904 T T T  
0.3355118145611998 0.1685776061648522 0.3018296551486744 T T T  
0.5870347565155826 0.1681991885616775 0.3019707747107740 T T T  
0.8372657605082257 0.1699416414586584 0.3016490080668451 T T T  
0.0871665497687552 0.4199599617493112 0.3016631099561788 T T T  
0.3348224049539746 0.4201393220499514 0.3012463157750936 T T T  
0.5890002534804233 0.4204397922907253 0.3031129204254801 T T T  
0.8396909124973936 0.4203977132398034 0.3018909673887991 T T T  
0.0880838674495891 0.6705660982034991 0.3019507348997116 T T T  
0.3365344753763054 0.6703570226385602 0.3018631668904653 T T T  
0.5869745428784705 0.6728325091686513 0.3008940676862108 T T T  
0.8402907586501122 0.6725370419082434 0.3012545013386944 T T T  
0.0876285276515873 0.9207456357789706 0.3017450287269145 T T T  
0.3369119080881113 0.9198028970115395 0.3020024695141638 T T T  
0.5871215682050747 0.9205993749396987 0.3016706894904698 T T T  
0.8376019225409714 0.9208231478952623 0.3015494572940084 T T T  
0.1690200631359396 0.0858067991641553 0.2248769512404813 T T T  
0.4189843400486425 0.0854797234337907 0.2254480459422701 T T T  
0.6692959897179546 0.0861976572450653 0.2249581031105495 T T T  
0.9193250277303371 0.0861427719804474 0.2248958339206727 T T T  
0.1687216949015310 0.3353847893725758 0.2246461918240995 T T T  
0.4190642601108497 0.3358385124806293 0.2260219799250147 T T T  
0.6687366942595967 0.3364581615441543 0.2266943866396313 T T T  
0.9189626553230567 0.3356201145587978 0.2249875781680089 T T T  
0.1690582969669729 0.5855304077079385 0.2250327350511805 T T T  
0.4187873596390010 0.5859655102122652 0.2250043199300434 T T T  
0.6689075340699023 0.5856002810240760 0.2260260534149890 T T T  
0.9196137969470998 0.5858866877430707 0.2252367622097602 T T T  
0.1691821000052615 0.8356947900284761 0.2251408900449510 T T T  
0.4191810501693076 0.8358513652044539 0.2250680696217098 T T T  
0.6695902289865783 0.8365919089049795 0.2246572196762904 T T T

0.9192980816850663 0.8362292853929912 0.2248539625598911 T T T  
0.0011084653085565 0.0015168391421458 0.1505306829772282 T T T  
0.2515017904212655 0.0014755007516685 0.1507946013361924 T T T  
0.5012181984426854 0.0016003599665240 0.1507177946915375 T T T  
0.7513139959727326 0.0019186123356975 0.1505260787396474 T T T  
0.0008764324073626 0.2516390287673934 0.1504734020720823 T T T  
0.2522251162379337 0.2518210012337750 0.1506641264167030 T T T  
0.5012617775004077 0.2516478576423753 0.1514654516895374 T T T  
0.7504027634446396 0.2527548752011380 0.1510315877241554 T T T  
0.0012406893257120 0.5017662512900068 0.1507458814616032 T T T  
0.2514740982380784 0.5016486850129078 0.1505851493684826 T T T  
0.5012538057285630 0.5013277052858095 0.1511653931945954 T T T  
0.7508879315194857 0.5014901054327062 0.1514224488234704 T T T  
0.0014546486702038 0.7515236607376564 0.1507631723551562 T T T  
0.2514096787407019 0.7515072420995773 0.1506542471225900 T T T  
0.5013200552615763 0.7516482983488307 0.1505443687396266 T T T  
0.7507759099986087 0.7503977657664972 0.1507228584811920 T T T  
0.0835668047871479 0.1673564839596450 0.0763213256060220 T T T  
0.3338225219860907 0.1673671279293800 0.0765038215324837 T T T  
0.5837524341677472 0.1675884529881515 0.0765697471219217 T T T  
0.8337330436283564 0.1675375096678275 0.0763405713484281 T T T  
0.0836221365813312 0.4174138122046118 0.0763603858089060 T T T  
0.3337237901136323 0.4172497650129029 0.0764154386610102 T T T  
0.5836962152558282 0.4172426844167887 0.0767630623341268 T T T  
0.8336376831314453 0.4174020151366739 0.0765680710264810 T T T  
0.0837175351536883 0.6673897216455092 0.0764000025138133 T T T  
0.3338208699807618 0.6674087800939792 0.0763148138096843 T T T  
0.5837643662564966 0.6671650581044577 0.0764443048796578 T T T  
0.8337169720157840 0.6672968442339817 0.0765163559821911 T T T  
0.0837357112150226 0.9174171049292004 0.0764082106370048 T T T  
0.3338095806481560 0.9174881137258030 0.0763775737573985 T T T  
0.5837614150387433 0.9175401151075546 0.0762777097039744 T T T  
0.8338339967340295 0.9176263028916679 0.0762997454347020 T T T  
0.16666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.16666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.16666666666666643 0.58333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.58333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.58333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666643 0.58333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.16666666666666643 0.83333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.83333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.83333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666643 0.83333333333333357 0.0000000000000000 F F F

1,2-propanediol on Ni(111)

1.0000000000000000

9.8304644461624697 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9152322230812402 8.5134319336650197 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.1198477615745013

C O H Ni

3 2 8 80

Selective dynamics

Direct

0.2074460006728395 0.3589950873217739 0.4072298495250284 T T T

0.3512987667518599 0.4312930187090931 0.3765800333845165 T T T

0.4496798953600242 0.6091401979880129 0.3804658894848439 T T T

0.4534558616907929 0.3690108593515716 0.3846932691886155 T T T

0.5923039820933300 0.6669456541397849 0.3537201815862451 T T T

0.1400773121310485 0.2313129065431673 0.4018701781751445 T T T

0.1307696943431765 0.4071854976647816 0.3985924616814019 T T T

0.3073548343559143 0.4038455151945540 0.3400580556435741 T T T

0.2406781280058354 0.3823847863022013 0.4436355203269853 T T T

0.4457897885453767 0.3036744524175384 0.3580921173500501 T T T

0.3862330043357654 0.6662024962922999 0.3667949409430677 T T T

0.4833378443598557 0.6450835233674325 0.4164929131128117 T T T

0.6287938458198895 0.5919686199990736 0.3603717155928007 T T T

0.0830269038596302 0.1666006546323399 0.2755991571671498 T T T

0.3328907868023195 0.1658576428348534 0.2755633356579619 T T T

0.5829757941008538 0.1671573044775538 0.2761029548997785 T T T

0.8333437437495984 0.1672069513840478 0.2758622889988524 T T T

0.0825815774491278 0.4169713444911660 0.2753606067670572 T T T

0.3316453694451199 0.4150730096975018 0.2745236966727360 T T T

0.5831634553807549 0.4149217456473444 0.2752289582723372 T T T

0.8331342343844671 0.4168287464116244 0.2758671070557254 T T T

0.0831037734068589 0.6668427555029329 0.2758939726678173 T T T

0.3314965214293660 0.6679110620341039 0.2749307450762397 T T T

0.5833369758249215 0.6674012782976985 0.2814299738062357 T T T

0.8351254570730433 0.6671268645433074 0.2753681349254966 T T T

0.0838202100486963 0.9173230635959873 0.2759685508381030 T T T

0.3329842621347520 0.9173365256728450 0.2760132427072897 T T T

0.5826303448862191 0.9186356124706440 0.2756808046774726 T T T

0.8351546424306919 0.9185192596453347 0.2757782846331994 T T T

0.1662807468825447 0.0834795586173490 0.2067824389694103 T T T

0.4166018490143771 0.0834910870273654 0.2068067890368418 T T T

0.6663979761040774 0.0833175620678872 0.2069346024622090 T T T

0.9158375556394296 0.0831319319186052 0.2068486825737781 T T T

0.1663802144901998 0.3336547156373273 0.2064420338186028 T T T

0.4163249528551154 0.3332730705248251 0.2065886482575569 T T T

0.6664425509515202 0.3336315314894706 0.2067483728117814 T T T

0.9161314264273149 0.3333181114805130 0.2067737466385973 T T T

0.1664467895381531 0.5833598590732200 0.2066244154746881 T T T

0.4181093002203625 0.5847119751890834 0.2076879593460661 T T T

0.6653330488014809 0.5842296233740250 0.2080244033656980 T T T  
0.9159873377666569 0.5832294586555232 0.2067693289079064 T T T  
0.1662477840804296 0.8333318229859911 0.2069542813002608 T T T  
0.4164608730118947 0.8339560982505658 0.2068117769074878 T T T  
0.6654562133075761 0.8317467809263401 0.2083803396841493 T T T  
0.9164261905800212 0.8335318476205827 0.2070034445439948 T T T  
-0.0005658979489526 -0.0002604843290016 0.1378693593249375 T T T  
0.2495442183249033 -0.0001882239053355 0.1377862586681949 T T T  
0.4997049947403820 -0.0000372056737375 0.1378337624885871 T T T  
0.7493484355114922 -0.0005775996642912 0.1380743988206665 T T T  
-0.0004802421084106 0.2497512013975894 0.1378312370812195 T T T  
0.2496634476539354 0.2498753858626968 0.1377053961850473 T T T  
0.4996361138663187 0.2499723141759901 0.1377732713363139 T T T  
0.7495454857524573 0.2499423398859174 0.1379178847922784 T T T  
-0.0003377241285772 0.5000924165226951 0.1378681947624491 T T T  
0.2501279827027456 0.5003239040274470 0.1378536120461105 T T T  
0.4998470909657070 0.5003621711622294 0.1381654708987506 T T T  
0.7493896510071719 0.5002599551836709 0.1379964742822539 T T T  
-0.0005703507402778 0.7499929806807950 0.1378874320227440 T T T  
0.2497276546425533 0.7501237043759666 0.1378229543864868 T T T  
0.4999892313485088 0.7501090116689531 0.1382377580415993 T T T  
0.7492461992071281 0.7499049597463593 0.1383328726679959 T T T  
0.0829990087161749 0.1664635520401989 0.0687986612269855 T T T  
0.3331839105348308 0.1665906131304612 0.0687785500562587 T T T  
0.5831883245354277 0.1666605415664412 0.0687948527144415 T T T  
0.8329621716849304 0.1663811054870843 0.0689216584070952 T T T  
0.0832774079594995 0.4167137464865667 0.0689166387779304 T T T  
0.3333234535302098 0.4167543227510251 0.0689049651957851 T T T  
0.5830344806471454 0.4168051554552933 0.0689271449511130 T T T  
0.8329329786231092 0.4167549723534091 0.0689172142826772 T T T  
0.0830561219847119 0.6666440439677032 0.0688359359331631 T T T  
0.3333720182246131 0.6667640701427604 0.0689329265228400 T T T  
0.5831054074425228 0.6666573548301407 0.0690468562008863 T T T  
0.8328698694895510 0.6666859672145679 0.0689614699667860 T T T  
0.0829848977512579 0.9164988432611502 0.0688297204705966 T T T  
0.3332033677702805 0.9165744456070334 0.0687960562644438 T T T  
0.5830981380292451 0.9164493914373346 0.0689433428600968 T T T  
0.8328611882202774 0.9163156489820884 0.0689551065047306 T T T  
0.16666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.16666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.16666666666666643 0.58333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.58333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.58333333333333357 0.0000000000000000 F F F



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

1,2-propanediol on Pd(111)

1.0000000000000000  
10.9793534407452995 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-5.4896767203726702 9.5083989882009199 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.0648899984884004

C O H Pd

3 2 8 80

Selective dynamics

Direct

0.2390974838221887 0.3839456152893216 0.4262960488923552 T T T  
0.3735664291665572 0.4505797147799929 0.3991952035292640 T T T  
0.4617476565101383 0.6093075993944023 0.4040129768725558 T T T  
0.4650977655500442 0.3963862258082924 0.4092738271873009 T T T  
0.5898896587497710 0.6645615142256748 0.3784213837507689 T T T  
0.1819773503018292 0.2694855740167614 0.4213116045356607 T T T  
0.1701391061249764 0.4240084769156034 0.4152235335809964 T T T  
0.3423425719247444 0.4287590139970839 0.3629772249850549 T T T  
0.2611543534017314 0.4057452576154228 0.4619781272357568 T T T  
0.4393121944871466 0.3149441291948414 0.3902171866746349 T T T  
0.4043653197792336 0.6607125628193874 0.3916652352300391 T T T  
0.4903483233722953 0.6378731140767642 0.4392279816513067 T T T  
0.6234694471712630 0.5978525600153742 0.3836041364791152 T T T  
0.0832232364366070 0.1658125644207275 0.2991498820109051 T T T  
0.3334635977656560 0.1655392585637144 0.2994269617147837 T T T  
0.5835498516230085 0.1663827820770483 0.2994120204425543 T T T  
0.8336662646371156 0.1665371594690153 0.2993452355953722 T T T  
0.0828834692473848 0.4161280198611227 0.2990732120757030 T T T  
0.3320176756180633 0.4148283223971253 0.2975147059544098 T T T  
0.5839265654815639 0.4150035444990972 0.2991376220258023 T T T  
0.8336483875999474 0.4161694515714423 0.2993541496863926 T T T  
0.0834788845558689 0.6661771651438487 0.2992583014959940 T T T  
0.3321919050150152 0.6668640399610374 0.2986319755982297 T T T  
0.5838456172223764 0.6670169122705776 0.3009893093932567 T T T  
0.8348799908948034 0.6662715505839045 0.2991764404171903 T T T  
0.0839451689795569 0.9164092334051431 0.2994571822421359 T T T  
0.3334476537167765 0.9164975739650869 0.2994287262851326 T T T  
0.5834796083188709 0.9175846762569952 0.2992681497378301 T T T  
0.8347687664937926 0.9173483264707728 0.2993370719064649 T T T  
0.1668095406168414 0.0828722199639876 0.2238020913090094 T T T  
0.4170141412357778 0.0829141946885966 0.2238122061512397 T T T  
0.6669089126358200 0.0827858058451122 0.2238309651446563 T T T  
0.9165207391641849 0.0826409369823563 0.2238041338865866 T T T  
0.1665825410229127 0.3328696030136972 0.2233138026982333 T T T

0.4169253478800702 0.3324454007760316 0.2235445951091904 T T T  
0.6669449508319004 0.3329543767691888 0.2237498508229781 T T T  
0.9166552559320693 0.3327142233345191 0.2237181491973408 T T T  
0.1667090288320943 0.5827507952444533 0.2235591942115971 T T T  
0.4178074927306463 0.5837795243169843 0.2238162729379286 T T T  
0.6664575407846021 0.5832038117196433 0.2243885066586992 T T T  
0.9166450219871173 0.5827517698119291 0.2237506396748438 T T T  
0.1668507318164927 0.8328776152677435 0.2238346823312212 T T T  
0.4169096657683240 0.8332943069563140 0.2237880723104975 T T T  
0.6663366761157706 0.8319881332824520 0.2245451429781829 T T T  
0.9170073070482382 0.8330442978986838 0.2239890832761096 T T T  
0.0000154577069748 0.9995014216493420 0.1496172510549379 T T T  
0.2500709266449020 0.9996015577894327 0.1495920456901342 T T T  
0.5001416665064177 0.9996637163777876 0.1495841598190247 T T T  
0.7499524700583720 0.9992858266999066 0.1497242546790843 T T T  
0.9998510688440335 0.2493909509127374 0.1494852023378458 T T T  
0.2501029025527048 0.2495292595914578 0.1494571662518003 T T T  
0.5001962600365036 0.2495640118835181 0.1495141629443424 T T T  
0.7500234648624483 0.2495164742541390 0.1495813233787805 T T T  
-0.0000080535482481 0.4996165940748059 0.1495284316173316 T T T  
0.2502808674766548 0.4998087519199438 0.1494260530575206 T T T  
0.5003340596327874 0.4998858905511377 0.1496918840901679 T T T  
0.7500242273913147 0.4997736436375503 0.1496397922419423 T T T  
0.0000486640793702 0.7497122251872855 0.1496588360495522 T T T  
0.2501411387587140 0.7497788257588178 0.1495632979527949 T T T  
0.5004404282292719 0.7499229896039309 0.1496865846784579 T T T  
0.7499574484432179 0.7496081490123653 0.1498997263359701 T T T  
0.0832881487516848 0.1663797586786022 0.0753791551379810 T T T  
0.3333577569652583 0.1663464921058906 0.0753820890314844 T T T  
0.5834746969140345 0.1665150047981614 0.0753679047724209 T T T  
0.8332986242678523 0.1662795479612374 0.0753361516851613 T T T  
0.0833938616329739 0.4164522674615385 0.0753138815870444 T T T  
0.3335012198567154 0.4164853958672637 0.0753977512618389 T T T  
0.5834003192571813 0.4165050210082865 0.0754290182626799 T T T  
0.8332810251531477 0.4164867797603432 0.0753498844181337 T T T  
0.0832877618713860 0.6664264329145433 0.0754016231636148 T T T  
0.3334589788533939 0.6666047177118183 0.0754129152044376 T T T  
0.5835028415847097 0.6665067142093672 0.0754812496455264 T T T  
0.8334106099207818 0.6665583404790029 0.0754760964734998 T T T  
0.0833757273124015 0.9164228824266186 0.0754146431893291 T T T  
0.3333811458623416 0.9165131225576081 0.0754097220894911 T T T  
0.5834112015559946 0.9164385270892963 0.0754314082343062 T T T  
0.8333285690699159 0.9163339812397936 0.0754898201288627 T T T  
0.16666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.16666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.41666666666666643 0.33333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666714 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

1,2-propanediol on Pt(111)

1.0000000000000000

11.0749925591741007 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5374962795870299 9.5912248942807192 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.1435599194664015

C O H Pt

3 2 8 80

Selective dynamics

Direct

0.2410785521466902 0.3898530224844743 0.4283096934371713 T T T

0.3741834738250894 0.4531212082710335 0.4013354348168039 T T T

0.4616539642078508 0.6106635268857753 0.4042123378938538 T T T

0.4646866490141005 0.3998019431875638 0.4114944756307873 T T T

0.5897163408621947 0.6608874941839329 0.3791159972932663 T T T

0.1826434717918407 0.2763018850703670 0.4236148981640799 T T T

0.1746072810261605 0.4314018579356551 0.4168428027204543 T T T

0.3409947582900357 0.4279008614794972 0.3651753303348513 T T T

0.2629747281870074 0.4122997478808186 0.4638779748565803 T T T

0.4438127138948739 0.3228753040591421 0.3911420963152545 T T T

0.4061854919782736 0.6612240986184561 0.3903394639552731 T T T

0.4913213678525689 0.6442168515292058 0.4389053295106678 T T T

0.6176666645857384 0.5901890121934359 0.3843246636469558 T T T

0.0848881565618638 0.1651814718558178 0.3016950997734476 T T T

0.3354535502089448 0.1648670312447596 0.3022798548254113 T T T

0.5859331674334808 0.1661931812813365 0.3018296452047939 T T T

0.8358884512338542 0.1663700612852320 0.3017367809729944 T T T

0.0846917160664973 0.4160698638958522 0.3014866851892608 T T T

0.3332125604770869 0.4135109357507578 0.2999435273279102 T T T

0.5862991669825514 0.4140152399403926 0.3015019229798794 T T T

0.8358835321084553 0.4158667356858444 0.3017294194429418 T T T

0.0855047057407076 0.6660421498645801 0.3017704466075172 T T T

0.3336695788724098 0.6671880983479361 0.3009533556658777 T T T

0.5864944667096557 0.6670911200895721 0.3034983146872777 T T T

0.8378376443509015 0.6662537742492268 0.3017510579814717 T T T

0.0862997988069663 0.9162600453826506 0.3021422145210460 T T T

0.3355212881616045 0.9165535350872009 0.3021205610712867 T T T

0.5855424926656531 0.9181110700436648 0.3017321866848944 T T T

0.8379196336960743 0.9180122391527905 0.3018720758605100 T T T

0.1687792598355927 0.0828415712908566 0.2252144406288474 T T T  
0.4189466643774820 0.0828769471509335 0.2251689056960344 T T T  
0.6688371011004005 0.0828912413584900 0.2249844462541414 T T T  
0.9183476812765843 0.0826378843311664 0.2249828892353918 T T T  
0.1682145548589315 0.3327212131917661 0.2246261486643612 T T T  
0.4187970050289692 0.3321005450770336 0.2250464060217129 T T T  
0.6691329351305420 0.3327051320988486 0.2247797864090459 T T T  
0.9183444195163583 0.3325362402529751 0.2249423051212758 T T T  
0.1681915643858134 0.5825342522483151 0.2246874107604798 T T T  
0.4193866560569344 0.5836362941775146 0.2256657512497597 T T T  
0.6685373108317123 0.5828315537711830 0.2262291221629129 T T T  
0.9185569787326409 0.5825090151416601 0.2249039909526964 T T T  
0.1687078174351239 0.8328386502527695 0.2251841593935431 T T T  
0.4187134182388807 0.8335577894093331 0.2250880952520035 T T T  
0.6681835907934293 0.8318101412562443 0.2265725693502296 T T T  
0.9190959495194214 0.8330051489168865 0.2254091845789351 T T T  
0.0015381961644459 0.9993149219688539 0.1507955435511915 T T T  
0.2515980443894053 0.9995005164261703 0.1507942341914192 T T T  
0.5016647104278552 0.9996721955619295 0.1506977547598613 T T T  
0.7508540477480399 0.9978673838205259 0.1509877034923223 T T T  
0.0017277405223869 0.2494068217636587 0.1506737188848941 T T T  
0.2516482649780497 0.2493404531733097 0.1506532044537309 T T T  
0.5014823581407784 0.2496602380882909 0.1507220586840033 T T T  
0.7516421249258541 0.2492986335169241 0.1505528093704813 T T T  
0.0014220151559624 0.4994120195018029 0.1505738121213666 T T T  
0.2528370055177940 0.5003231532581703 0.1505810061782769 T T T  
0.5019066987045171 0.4998943434482459 0.1511594024836456 T T T  
0.7510514371670118 0.5002622135825385 0.1507708448645720 T T T  
0.0015943728502748 0.7496917036103155 0.1507862396033373 T T T  
0.2516621052457843 0.7497903730773552 0.1506879029547677 T T T  
0.5018371626019780 0.7495867515709763 0.1511857162351759 T T T  
0.7513726788751640 0.7494664214879410 0.1514466994313471 T T T  
0.0842275675978153 0.1663204092012288 0.0763958598383757 T T T  
0.3344133981661381 0.1663333380903400 0.0763772087537208 T T T  
0.5845583578913001 0.1663969316870307 0.0763860878647804 T T T  
0.8342826202804878 0.1663745484462905 0.0764207143589850 T T T  
0.0840735929877950 0.4162032105264247 0.0763605155119680 T T T  
0.3344580932653048 0.4165097636784164 0.0764530114329495 T T T  
0.5844514085680302 0.4164918658698255 0.0764631218294965 T T T  
0.8344672201262887 0.4163372360114886 0.0763557424282842 T T T  
0.0842648409736488 0.6663637402312067 0.0764036353962453 T T T  
0.3344249195963089 0.6665568583006379 0.0764032029790879 T T T  
0.5844308364771932 0.6665922575359534 0.0767125687460953 T T T  
0.8343283094734574 0.6664611256246090 0.0765039505760607 T T T  
0.0842971893514667 0.9163635505549953 0.0764122056561193 T T T  
0.3343384680641405 0.9164439627127561 0.0763919864956866 T T T  
0.5844792657635999 0.9165869750491762 0.0765074332255251 T T T  
0.8342188250910944 0.9163147603668202 0.0765578415045690 T T T  
0.16666666666666643 0.08333333333333357 0.0000000000000000 F F F

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

1,3-propanediol on Ni(111)

1.0000000000000000  
9.8304644461624999 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-4.9152322230812402 8.5134319413764192 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.0148388003470998

C O H Ni

3 2 8 80

Selective dynamics

Direct

0.4615951426851364 0.4489412764254816 0.3814210316551525 T T T  
0.5681825197917133 0.6258490051066582 0.3830872599550942 T T T  
0.7393035770758605 0.6751790311975049 0.3937319904096304 T T T  
0.3192027959917395 0.3997309152646247 0.3544527288376323 T T T  
0.8393764014043800 0.8407729942894975 0.3941376483838677 T T T  
0.2657955805134134 0.4550784090410713 0.3651187115795002 T T T  
0.4263426825172624 0.3967630238103540 0.4160443966829417 T T T  
0.5250385712612019 0.6815101858182934 0.4075084147436164 T T T  
0.5196937579887350 0.3924285085552315 0.3636522767669688 T T T  
0.5658171537080867 0.6744079991274793 0.3484496323973662 T T T  
0.7492359776537049 0.6330940283040819 0.4280810442164844 T T T  
0.7797660511222503 0.6190604692801022 0.3680282149445797 T T T  
0.8596968977128691 0.8763537660950907 0.3619448371036472 T T T  
0.0799374692422820 0.1630027744438820 0.2767627347115293 T T T  
0.3316438102488685 0.1628889203772867 0.2765569497980939 T T T  
0.5821016694055793 0.1650565712101560 0.2768508138946938 T T T  
0.8319506337468532 0.1651435727533833 0.2769100987780768 T T T  
0.0801441833706540 0.4157103405097388 0.2764607382873682 T T T  
0.3314628756340013 0.4144820256865585 0.2820127345991926 T T T  
0.5841670502729526 0.4151188157532134 0.2759827769057581 T T T  
0.8319377397525243 0.4151420618909333 0.2770095710081971 T T T  
0.0816613260926586 0.6652578083595267 0.2771448512899520 T T T  
0.3312220922159084 0.6664223730641318 0.2765075250759640 T T T  
0.5835780300424749 0.6667001429091387 0.2761837346517705 T T T

0.8326312724431837 0.6654222366105176 0.2767602464974952 T T T  
0.0811343233511024 0.9144331667127553 0.2772400941056760 T T T  
0.3319102148389148 0.9149767902455925 0.2770362430274212 T T T  
0.5819975325266518 0.9153606799531252 0.2767156278920243 T T T  
0.8318628321616400 0.9153627924751073 0.2762971934720405 T T T  
0.1653235511424166 0.0818833729738582 0.2078227790238946 T T T  
0.4156704194601720 0.0823188998276791 0.2076641998894114 T T T  
0.6656556946475297 0.0820648874275125 0.2076364747234282 T T T  
0.9158012429290706 0.0826494475298932 0.2074557125127950 T T T  
0.1668525402722287 0.3327601294122412 0.2088618013908771 T T T  
0.4146176340874287 0.3328230395255170 0.2087603724461038 T T T  
0.6655634823689980 0.3319712570186029 0.2074890732664548 T T T  
0.9155248676901924 0.3318757901098672 0.2075473376317841 T T T  
0.1653393841937431 0.5821406244369117 0.2076736436684581 T T T  
0.4145090113831597 0.5804718226454135 0.2086943300806538 T T T  
0.6657270921747155 0.5823201599417147 0.2074554877262101 T T T  
0.9155155325760833 0.5819010215305759 0.2077086898489937 T T T  
0.1655973394805763 0.8321942830937803 0.2078997060916638 T T T  
0.4156276177729731 0.8319084847761093 0.2075999254812725 T T T  
0.6651647678663797 0.8319276081006162 0.2073385692540601 T T T  
0.9155544152456117 0.8321174168208498 0.2076152507610187 T T T  
0.9994030560468881 -0.0007485200362311 0.1384028506303613 T T T  
0.2491503577145239 -0.0008376208629262 0.1384768727403333 T T T  
0.4991002179946555 -0.0008360634417701 0.1384696359119951 T T T  
0.7492580188169292 -0.0008647861702529 0.1383830010373165 T T T  
0.9996640292385960 0.2494399395415953 0.1384793691876452 T T T  
0.2492836470894530 0.2493600944280342 0.1388119651463723 T T T  
0.4989439321018553 0.2492932608740107 0.1385226762632121 T T T  
0.7491891312598306 0.2491433518404777 0.1384059449902241 T T T  
0.9993507515919218 0.4992141214297529 0.1384075919511407 T T T  
0.2493073371921125 0.4989218730814436 0.1387564295211832 T T T  
0.4988455380922672 0.4989552563991150 0.1387250718373330 T T T  
0.7491882765258111 0.4991686692470388 0.1383548943085761 T T T  
0.9993264251807766 0.7491425299152809 0.1384097664391237 T T T  
0.2491688896346200 0.7491340903926043 0.1384299304992037 T T T  
0.4988426185103986 0.7486650015324857 0.1384347834499935 T T T  
0.7492260672960825 0.7491406272986564 0.1382918050503155 T T T  
0.0831145099568100 0.1663443563860817 0.0691957412160082 T T T  
0.3328237671602677 0.1663132092467385 0.0692467645536016 T T T  
0.5827955033616589 0.1663138627404980 0.0691786310644723 T T T  
0.8331314774490027 0.1663322486138775 0.0691910950179938 T T T  
0.0831195239724091 0.4162940768823554 0.0691884943590565 T T T  
0.3328698398687210 0.4161599626509191 0.0692765007501980 T T T  
0.5827846596996797 0.4162735605462509 0.0691920411158480 T T T  
0.8329000194417586 0.4161831068518169 0.0691046534600940 T T T  
0.0829535181851515 0.6661785378497905 0.0691041634989170 T T T  
0.3328035130632037 0.6660321990464286 0.0692155713352909 T T T  
0.5827814369390810 0.6660322220044548 0.0691669372593338 T T T  
0.8329292687034414 0.6662161053564120 0.0691230413492881 T T T

0.0829726833461913 0.9162840865918468 0.0691186857716786 T T T  
0.3329145818320337 0.9162490334865999 0.0691212505799103 T T T  
0.5828213467007165 0.9160491082629713 0.0691833301885283 T T T  
0.8329526831696286 0.9163057219570280 0.0690745241004721 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

1,3-propanediol on Pd(111)

1.0000000000000000  
10.9793534407452995 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-5.4896767203726702 9.5083989968135505 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.9582178308607006

C O H Pd

3 2 8 80

Selective dynamics

Direct

0.1446088916231372 0.6030238947967934 0.4050566421754613 T T T  
0.3003911485722191 0.7111040469250745 0.4037524748843350 T T T  
0.3952727853328653 0.6496225787403900 0.4143552806986153 T T T  
0.0583300186379471 0.6459145909973555 0.3803458803613634 T T T  
0.5406012335492737 0.7504084748616229 0.4096684188747558 T T T  
0.0763365459090710 0.7370174806901332 0.3913686230804093 T T T  
0.1041477690686980 0.5774448428304328 0.4394980939756013 T T T  
0.3264032896234468 0.8014738583490841 0.4257027463161584 T T T  
0.1242108379421625 0.5047936671237807 0.3885505518258908 T T T  
0.3257731220714476 0.7539556496592706 0.3690246783491472 T T T  
0.3814018911625161 0.6126818897698414 0.4491590783963997 T T T  
0.3651085476225637 0.5573133230210556 0.3924163156723384 T T T  
0.5595752206669360 0.7727583343156563 0.3777198937827257 T T T  
0.0812464083639500 0.1654927665926806 0.3005674945632153 T T T  
0.3311032930272457 0.1656447258416081 0.3005582480817918 T T T  
0.5809977045919220 0.1653334733420037 0.3004555922490828 T T T  
0.8309076681023049 0.1650296003128878 0.3005787783921066 T T T  
0.0810131484545141 0.4139107872256365 0.3000953597769443 T T T  
0.3312422815818842 0.4154439315691202 0.3006517053345205 T T T

0.5806944252311299 0.4153268087855094 0.3005234090517681 T T T  
0.8297676301108867 0.4140569904304372 0.3003747404553650 T T T  
0.0800725684629678 0.6650330554599072 0.3022417002222745 T T T  
0.3324058543514792 0.6657490516484147 0.2991758553279579 T T T  
0.5814281985866071 0.6653562480141670 0.3004863329593803 T T T  
0.8297333746996602 0.6654831851405429 0.3004344890564689 T T T  
0.0809689974932741 0.9166010163970942 0.3005943746754898 T T T  
0.3319390643742485 0.9166833650374507 0.3003595556713770 T T T  
0.5815879783099054 0.9158131985101573 0.3005470187122518 T T T  
0.8309846993632748 0.9155891726886241 0.3008113676205937 T T T  
0.1645975233903822 0.0821022970435319 0.2247362037515356 T T T  
0.4143129229003899 0.0821114887968172 0.2246878926649056 T T T  
0.6645687328264257 0.0823824497991602 0.2246524686974175 T T T  
0.9146194520204259 0.0822182967757037 0.2248016175925611 T T T  
0.1647394480248099 0.3323735490677172 0.2246250780414167 T T T  
0.4145206506608571 0.3321863332636161 0.2247251626186936 T T T  
0.6645251330195698 0.3323092014582651 0.2246852446022260 T T T  
0.9142640809044206 0.3319409654640375 0.2247568919643793 T T T  
0.1637221729195077 0.5824455371124424 0.2249929329326894 T T T  
0.4144565032961429 0.5820943251364119 0.2245137399623690 T T T  
0.6646354070542717 0.5820258563256345 0.2246143520078786 T T T  
0.9150358276318952 0.5824409944523387 0.2252884507654142 T T T  
0.1639112408394123 0.8312176845808753 0.2254507193075377 T T T  
0.4148668408396589 0.8327597647988462 0.2244313122878318 T T T  
0.6645026016022355 0.8322012642913036 0.2248007451955329 T T T  
0.9143785486188767 0.8322667757266031 0.2249369754473350 T T T  
0.9981623030011719 0.9990308797257706 0.1503218729605759 T T T  
0.2479974192402767 0.9987869820613118 0.1503473175535710 T T T  
0.4982914033235330 0.9992911962164852 0.1501324071377860 T T T  
0.7482544328690365 0.9991293741918246 0.1502138878609139 T T T  
0.9981527842999788 0.2491210690850724 0.1502361312153268 T T T  
0.2482033756620013 0.2491114765529275 0.1502051929621217 T T T  
0.4981972301376737 0.2491317331874872 0.1502266965119715 T T T  
0.7482699469432553 0.2492389945499658 0.1501760364220079 T T T  
0.9980981584411358 0.4992221321645021 0.1503847439348348 T T T  
0.2480435241411557 0.4992561041546907 0.1501709926456797 T T T  
0.4981717031637700 0.4991001708709678 0.1501962839105992 T T T  
0.7484176414173281 0.4991732268318663 0.1502441711054914 T T T  
0.9981940628611180 0.7489732034639016 0.1505288183339088 T T T  
0.2478818352011941 0.7490779279417872 0.1503834906425844 T T T  
0.4982955191318292 0.7492050326298402 0.1501271062340615 T T T  
0.7482626965474860 0.7491249707262680 0.1502747708711957 T T T  
0.0822997447430960 0.1661435631368174 0.0757456937359958 T T T  
0.3321823106143335 0.1660311126670711 0.0756933599724680 T T T  
0.5822029820866247 0.1662544832112711 0.0757055924248361 T T T  
0.8322520360721084 0.1661201320518545 0.0757245635356913 T T T  
0.0821590802437712 0.4161609422570263 0.0757467282351775 T T T  
0.3322144348066379 0.4162390651496209 0.0756544948396459 T T T  
0.5823378474259402 0.4162320579707727 0.0756644869370197 T T T



0.8323427294063515 0.4162402447402010 0.0757226925437267 T T T  
0.0822124851366057 0.6661896632182879 0.0758086256523135 T T T  
0.3322162338095051 0.6662661929689987 0.0757337939572418 T T T  
0.5822724075168059 0.6660955635811956 0.0757234232639123 T T T  
0.8323793659823858 0.6662475246986576 0.0757739874152785 T T T  
0.0821969072104187 0.9160807796015792 0.0758145178504330 T T T  
0.3321837141224072 0.9161231155726897 0.0757617115318119 T T T  
0.5823469651314149 0.9162367090877473 0.0756860665240071 T T T  
0.8322862435623146 0.9161521900931948 0.0757570941420696 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.91666666666666714 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

1,3-propanediol on Pt(111)

1.0000000000000000  
11.0749925591741007 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-5.5374962795870299 9.5912248942807192 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.1435599194664015

C O H Pt

3 2 8 80

Selective dynamics

Direct

0.2362622452223226 0.3859372914427557 0.4207824536118546 T T T  
0.3875591677144573 0.4504219869981906 0.4051442653927648 T T T  
0.4685621034319170 0.6082027415931340 0.4060521779991508 T T T  
0.1622528704136137 0.2385078199455162 0.4163217231995242 T T T  
0.5964464649873474 0.6685575219665690 0.3796319621270331 T T T  
0.1451320810164242 0.2162599148314866 0.3845361072288103 T T T  
0.1847331728648813 0.4338886193815367 0.4020823982768787 T T T  
0.3836669806921718 0.4170096548544019 0.3697583103638569 T T T  
0.2318905437422806 0.4070167583145068 0.4562818457447782 T T T  
0.4412298374430383 0.4047929590504846 0.4235146496747153 T T T  
0.4080278239621754 0.6524155794622051 0.3913949000528580 T T T  
0.4992885476231474 0.6494924758201227 0.4399792957124399 T T T  
0.6459534153541306 0.6177524261347292 0.3854732817425520 T T T  
0.0868406715570459 0.1669340368231986 0.3021370510863562 T T T

0.3369425838928373 0.1659715764925987 0.3018564300953850 T T T  
0.5875657823263088 0.1673260219125204 0.3017178928490880 T T T  
0.8376839773238977 0.1676539946294427 0.3019049125529156 T T T  
0.0869687499648991 0.4173322249011599 0.3020107248958094 T T T  
0.3354360414164163 0.4145721873918061 0.3006836340139229 T T T  
0.5882124476982458 0.4153783508139444 0.3014093603468448 T T T  
0.8377377297090839 0.4171523073663379 0.3018086421782136 T T T  
0.0872726141617984 0.6671247732076229 0.3019271951113187 T T T  
0.3354657698031291 0.6677229492073196 0.3015949656827544 T T T  
0.5877340920055291 0.6676219594349246 0.3036847060990887 T T T  
0.8396064000491179 0.6675254156903326 0.3019214260438219 T T T  
0.0878335980282631 0.9175011559795005 0.3021989067977559 T T T  
0.3370593331603962 0.9174712059598338 0.3021311295411813 T T T  
0.5871997541182901 0.9190419104860309 0.3018558235778931 T T T  
0.8395373588064093 0.9193321966965775 0.3019690850579373 T T T  
0.1696236377252670 0.0838681662640668 0.2252297450009834 T T T  
0.4199707337708545 0.0837520763488158 0.2251169200079770 T T T  
0.6701315632040833 0.0836948948361472 0.2250602800815692 T T T  
0.9195332484778990 0.0836320679687736 0.2251022002727381 T T T  
0.1695506707415652 0.3336955081240069 0.2249988951494634 T T T  
0.4200021486470228 0.3332248365972416 0.2249930130368495 T T T  
0.6703104364299830 0.3335860673251941 0.2247731663306351 T T T  
0.9197069681557422 0.3335770284406891 0.2251709942831727 T T T  
0.1694585437986607 0.5833799649554500 0.2250203457131985 T T T  
0.4206259629930482 0.5843417090999725 0.2260901084425320 T T T  
0.6699810659225565 0.5840160052615884 0.2262483015176351 T T T  
0.9198041124883067 0.5834790569146557 0.2249867254290732 T T T  
0.1697259409240429 0.8337239175388227 0.2252684923750098 T T T  
0.4196707974369848 0.8341016223430561 0.2253247715957692 T T T  
0.6695411180343814 0.8328886318128934 0.2266279329696013 T T T  
0.9202254672249548 0.8339688590566381 0.2255434807530912 T T T  
0.0024862767692785 0.0002125463048185 0.1509127601699741 T T T  
0.2524928029409413 0.0002644125008237 0.1507967180817882 T T T  
0.5024268200296597 0.0002903389844103 0.1508237710298508 T T T  
0.7516051768700140 0.9986312672416603 0.1509805491105567 T T T  
0.0026325107296068 0.2502064426450704 0.1508672123072853 T T T  
0.2524787372882082 0.2501740214868142 0.1507510746283119 T T T  
0.5024192705750447 0.2503496688169768 0.1506701766039227 T T T  
0.7526600451640219 0.2500622775381123 0.1506793937410027 T T T  
0.0024501849351263 0.5001264897582995 0.1507213679477800 T T T  
0.2538884402670269 0.5011845165575063 0.1508368883727829 T T T  
0.5027778751966222 0.5007047077001238 0.1512801286310978 T T T  
0.7519658122083961 0.5010329340641141 0.1508075139887336 T T T  
0.0024244800764156 0.7504491243846720 0.1508702677894472 T T T  
0.2524731383300842 0.7504227970617720 0.1508524505688997 T T T  
0.5026632525186574 0.7502894910765671 0.1513974509599914 T T T  
0.7523433759449122 0.7503434983803260 0.1515408506843782 T T T  
0.0847350147701141 0.1667707226662512 0.0764539429114828 T T T  
0.3348392344396730 0.1667844009478187 0.0763971667006913 T T T

0.5850483000042422 0.1668060130902559 0.0764019829865824 T T T  
0.8349001405970837 0.1668648817175181 0.0764959968789844 T T T  
0.0846741530010771 0.4166736184301995 0.0764657243577314 T T T  
0.3348481817474727 0.4169337674376349 0.0765334146822206 T T T  
0.5848780052704433 0.4168997353942425 0.0764779102757866 T T T  
0.8349837260986986 0.4167587161413965 0.0764183095516589 T T T  
0.0847412305811510 0.6667408576091055 0.0764498558984525 T T T  
0.3348434860806865 0.6668628245818505 0.0765310603038156 T T T  
0.5847983620578175 0.6669834173556529 0.0768240643800876 T T T  
0.8347225347032368 0.6669291116920483 0.0765653043263178 T T T  
0.0846986694285770 0.9167524568488075 0.0764675257510297 T T T  
0.3348015046568735 0.9167676076988215 0.0764287694601988 T T T  
0.5849265556036246 0.9168795397126617 0.0765637408818231 T T T  
0.8346839652010709 0.9167053732351031 0.0766026894365705 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

glycerol on Ni(111)

1.0000000000000000  
9.8304644461624697 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-4.9152322230812402 8.5134319336650197 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.1198477615745013

C O H Ni

3 3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.2064352346969106 0.3611106346507949 0.3980039957038254 T T T  
0.3714491948530003 0.4412129050664296 0.3776268367132241 T T T  
0.4644538052117381 0.6178762178279390 0.3811574460869389 T T T  
0.1370712857214844 0.1948450999694437 0.3939858567023845 T T T  
0.4654389202938721 0.3820524011881974 0.3953455377786436 T T T  
0.6062318274903582 0.6805759874817092 0.3535727871622076 T T T  
0.1044531762913058 0.1660496415400794 0.3618049315041082 T T T  
0.1363475173617009 0.4048451126429375 0.3802173232566066 T T T  
0.3530820838576584 0.4130724522173629 0.3393291099620590 T T T

0.2105733772902269 0.3865507070007646 0.4349701578339916 T T T  
0.4003016971206981 0.2675590877356486 0.3946653596261366 T T T  
0.3977199092146482 0.6710317220201266 0.3672234067686908 T T T  
0.4987255633926523 0.6556941874325440 0.4169715916810446 T T T  
0.6592591100279268 0.6217255455352694 0.3615491518381093 T T T  
0.0854220930261080 0.1682069199795189 0.2755709320330940 T T T  
0.3349785051682730 0.1672150582595971 0.2760627666867767 T T T  
0.5855960569642584 0.1683731490364829 0.2763664124528423 T T T  
0.8360052784138922 0.1684786821777058 0.2764065621093815 T T T  
0.0853915919403261 0.4182477290647280 0.2761043788008546 T T T  
0.3342909958918031 0.4166758284987905 0.2753996259525573 T T T  
0.5861709409566512 0.4165178335195857 0.2757037625177530 T T T  
0.8359834179801788 0.4182377829784309 0.2763034959731598 T T T  
0.0858868700433483 0.6681403626302138 0.2764074925323138 T T T  
0.3341814685138203 0.6690236093708704 0.2754098107159495 T T T  
0.5873373818706035 0.6695307237715696 0.2809787392556438 T T T  
0.8385404232193197 0.6686826474142790 0.2755782140307125 T T T  
0.0862933227388643 0.9188425927114823 0.2764982875474409 T T T  
0.3354811892352219 0.9184920610460148 0.2764080494062752 T T T  
0.5851916646445419 0.9199843873579973 0.2759445577960009 T T T  
0.8382632842198728 0.9204259419280533 0.2760454937258305 T T T  
0.1685056872273556 0.0846321300393251 0.2071383551221294 T T T  
0.4186885610313708 0.0847041183221777 0.2073090596308429 T T T  
0.6687393582710782 0.0845819779935122 0.2072947368000725 T T T  
0.9179878216040652 0.0844351771598527 0.2070439149976955 T T T  
0.1687869902819174 0.3350633639967630 0.2069410314670209 T T T  
0.4184978790657796 0.3344809772140387 0.2070582561267954 T T T  
0.6685966176871144 0.3347024166630448 0.2071913584611135 T T T  
0.9184559387403630 0.3344161508976270 0.2072571823437465 T T T  
0.1685507257282355 0.5843669435101468 0.2071078191788422 T T T  
0.4202201740968555 0.5856709327506655 0.2080818496733865 T T T  
0.6678445251334159 0.5853527137818821 0.2082556746135874 T T T  
0.9184071291671445 0.5842773334833989 0.2071184257191578 T T T  
0.1683192365873716 0.8344414033073646 0.2074391672862743 T T T  
0.4185507788662222 0.8349531100470552 0.2071942265330910 T T T  
0.6678259972249809 0.8332598137153980 0.2084646003365879 T T T  
0.9187234257636880 0.8348787958579423 0.2072463379625819 T T T  
0.0011818611788519 0.0007645059847198 0.1381333125045767 T T T  
0.2512967651085799 0.0007797112848282 0.1381630846596414 T T T  
0.5012478541352273 0.0008477495077813 0.1382246604734008 T T T  
0.7510068718478357 0.0004449931499408 0.1383058130257626 T T T  
0.0012639418699917 0.2508041137576659 0.1381536846149055 T T T  
0.2513619312009640 0.2509107527447513 0.1380689309002736 T T T  
0.5013238394060708 0.2508643070544427 0.1381144921246012 T T T  
0.7511963811129186 0.2508163376570726 0.1382767409286618 T T T  
0.0012477395478692 0.5008596786199297 0.1382079502258282 T T T  
0.2517092498141345 0.5012175290130254 0.1381546393881454 T T T  
0.5014255805644439 0.5011477598829951 0.1384493663931889 T T T  
0.7510955120161049 0.5010798980743351 0.1382885130760832 T T T

0.0012596738337482 0.7509097235747738 0.1382033136950932 T T T  
0.2513321430763888 0.7509337062838640 0.1381846043773478 T T T  
0.5015208342234084 0.7508616859165754 0.1384706364368967 T T T  
0.7509823051369271 0.7507705850370469 0.1385434742551650 T T T  
0.0839306853612397 0.1671041639321420 0.0689855446869197 T T T  
0.3340155398738688 0.1670958645279151 0.0690079001801259 T T T  
0.5840913321557580 0.1671546328661999 0.0690165553677588 T T T  
0.8338435760859046 0.1669131464741242 0.0690848574107068 T T T  
0.0840791886972284 0.4171423234563856 0.0690733799129461 T T T  
0.3342029737943243 0.4172388069864224 0.0690679448571689 T T T  
0.5839747268935138 0.4172353596766150 0.0690980777715141 T T T  
0.8338647921045911 0.4171640924678877 0.0691010329200609 T T T  
0.0839725395685937 0.6670864456964793 0.0690262683126758 T T T  
0.3341796216228423 0.6672350472050040 0.0690824686655496 T T T  
0.5840530713597897 0.6671769193903011 0.0691737654739656 T T T  
0.8338735605946708 0.6671690586755599 0.0691302917683947 T T T  
0.0839579699648577 0.9170475164890914 0.0690242497750350 T T T  
0.3341178688169244 0.9171129301400073 0.0690171895649329 T T T  
0.5839921712849523 0.9169864867036610 0.0691213527127904 T T T  
0.8338987631193459 0.9169693090683255 0.0690973930120333 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

glycerol on Pd(111)

1.0000000000000000  
10.9793534407454008 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-5.4896767203726604 9.5083989882009092 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.0649611851693983

C O H Pd

3 3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.4284046816665755 0.3975728618927915 0.4240370802398247 T T T  
0.4283011259418871 0.5106863613863916 0.3945666241260742 T T T  
0.3449190480395903 0.5769373918189210 0.4114356421650432 T T T

0.5310828472277603 0.3640931082277643 0.4082928996641846 T T T  
0.5686920876199016 0.6206635973873238 0.3861961892346511 T T T  
0.3556289794092390 0.6857096075992776 0.3821005950626705 T T T  
0.4976047999879322 0.3112444411144293 0.3802157812801255 T T T  
0.3219761529008862 0.3042773184639302 0.4250357332638497 T T T  
0.3786139147788697 0.4573526009201220 0.3618211438660530 T T T  
0.4606785205740584 0.4372127967336413 0.4581694731827943 T T T  
0.6260807894271391 0.5747142813087176 0.3856797679603706 T T T  
0.2325796425069098 0.4978067589368686 0.4131871437468151 T T T  
0.3822795626192790 0.6224789338445240 0.4448082434891603 T T T  
0.4550886940992020 0.7580552539195911 0.3804605876641632 T T T  
0.0826978178838299 0.1634940878031938 0.2995617691820039 T T T  
0.3333633305411227 0.1637584942921936 0.2997126502441506 T T T  
0.5832862996488285 0.1643020565383810 0.2997402449938747 T T T  
0.8330243881031331 0.1642660190050656 0.2995340008736703 T T T  
0.0814917069974245 0.4128060122900389 0.2994142954288784 T T T  
0.3318192555493969 0.4117957871318134 0.2980440655802153 T T T  
0.5839129872058920 0.4133831287213150 0.2987930792991011 T T T  
0.8329086425152509 0.4139170824666803 0.2996073300364189 T T T  
0.0821197271291999 0.6641258379910958 0.2996010528794620 T T T  
0.3317722123198286 0.6637787604373476 0.3010227072875042 T T T  
0.5858526737839791 0.6660976676831242 0.2998330406547899 T T T  
0.8339580121703573 0.6642159740829032 0.2993272110302514 T T T  
0.0834184448112903 0.9145141454488181 0.2996984460511002 T T T  
0.3331777284485259 0.9152009225750826 0.2996621515353785 T T T  
0.5844211017030350 0.9161217359971660 0.2992872133746076 T T T  
0.8343426504600908 0.9151934379060294 0.2995939326187610 T T T  
0.1666579897157537 0.0814344689165279 0.2239975039945652 T T T  
0.4168095543034355 0.0813027801336478 0.2240387675567328 T T T  
0.6666255599352356 0.0815575696081820 0.2238451778193913 T T T  
0.9164824038303578 0.0814533830939167 0.2239275914882502 T T T  
0.1662094571672071 0.3311251875866404 0.2237155808136269 T T T  
0.4166074634805049 0.3311936470245073 0.2235429627748557 T T T  
0.6668072920160569 0.3313390246320050 0.2237548359926072 T T T  
0.9166972156386463 0.3315590602247688 0.2239232385234388 T T T  
0.1675518979201396 0.5817806920020335 0.2246064639128465 T T T  
0.4170688631252950 0.5823943676822968 0.2243325876480696 T T T  
0.6665418168010945 0.5817363456341691 0.2239237167874530 T T T  
0.9168180235536799 0.5812711341950179 0.2239351853091122 T T T  
0.1666258401251043 0.8314431587465876 0.2241767236315333 T T T  
0.4162916977146744 0.8308149058642991 0.2245939606841308 T T T  
0.6667293463350341 0.8312650718414427 0.2242885132677892 T T T  
0.9168449538338010 0.8315904848247854 0.2240033874531582 T T T  
0.9999778556262487 0.9987376629561308 0.1496819755071222 T T T  
0.2499818985116030 0.9986690492031280 0.1498026306725855 T T T  
0.4999173097033131 0.9985186501260430 0.1498270834029676 T T T  
0.7499328812181918 0.9985254926078948 0.1497753993713711 T T T  
-0.0000915865896955 0.2486919812430045 0.1496627943986801 T T T  
0.2499175312303885 0.2486978481081559 0.1496072855842042 T T T

0.5000786052900187 0.2485582414723405 0.1496165657207872 T T T  
0.7501462968484014 0.2487916558198699 0.1496513156558743 T T T  
0.0004192315043424 0.4989623101465440 0.1498384994082776 T T T  
0.2502898949972843 0.4990786752258160 0.1499017022635838 T T T  
0.5000666228990803 0.4990007792300125 0.1496860818340558 T T T  
0.7501693992896633 0.4989264286845793 0.1496912225150809 T T T  
0.0001443465548788 0.7488520007618998 0.1497996794190930 T T T  
0.2501824601277254 0.7487184652816400 0.1500230816043087 T T T  
0.5000714402377533 0.7489232088462167 0.1499193239338648 T T T  
0.7500063636088344 0.7488723685438410 0.1497466597650507 T T T  
0.0833075357841429 0.1659824599403696 0.0754485972666530 T T T  
0.3333867041929461 0.1659313417745005 0.0754702232298329 T T T  
0.5833645454585812 0.1659019053380741 0.0754031594048832 T T T  
0.8333218908162781 0.1659979661909641 0.0754355295106369 T T T  
0.0835030502045623 0.4161129718510081 0.0755189770667871 T T T  
0.3333723352179241 0.4161035138784677 0.0754796644320458 T T T  
0.5833528068347292 0.4160708108073906 0.0754392334117875 T T T  
0.8334963767922330 0.4160828176718761 0.0754321152382318 T T T  
0.0834706189947096 0.6660558831498515 0.0755647782113533 T T T  
0.3333855301641948 0.6660962078800723 0.0755617011036858 T T T  
0.5833614174935757 0.6660960512857891 0.0755051740818389 T T T  
0.8334574987926135 0.6660729689624119 0.0754986824772468 T T T  
0.0834219867247836 0.9160159139725151 0.0754880182392504 T T T  
0.3333196199525167 0.9159134180450755 0.0755653797495252 T T T  
0.5832919726711943 0.9159070523223541 0.0755258701421728 T T T  
0.8333953975284010 0.9160258454330246 0.0754766485488816 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F

glycerol on Pt(111)

1.0000000000000000

11.0749925591741007 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5374962795870299 9.5912248942807192 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 30.1435599194664015

C O H Pt

3 3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.2365692881107844 0.3818969764377770 0.4196104176342171 T T T  
0.3844847212624505 0.4514562881144632 0.4009141090076461 T T T  
0.4722676671040398 0.6074304721739429 0.4061848201615836 T T T  
0.1726903622915990 0.2348689468792547 0.4143860366390426 T T T  
0.4606991913332229 0.3896868725142212 0.4158202443271741 T T T  
0.5998309088761654 0.6647887379661969 0.3803400647229794 T T T  
0.1424954434661240 0.2116897336846825 0.3831703331420680 T T T  
0.1775454182882368 0.4246823551498328 0.4027119309665949 T T T  
0.3673757097096756 0.4323695162245772 0.3628470865341764 T T T  
0.2392550389468208 0.4016598987715800 0.4555324114216029 T T T  
0.3953728267826710 0.2888235873002931 0.4158671891953429 T T T  
0.4163599199777712 0.6596617919028396 0.3941422998027438 T T T  
0.5021118428655410 0.6345340928828966 0.4412267426946467 T T T  
0.6418331858056949 0.6062113928490306 0.3853833076951056 T T T  
0.0885236595781130 0.1673510756046178 0.3023171544642604 T T T  
0.3389185925251037 0.1664677571406204 0.3018205161837027 T T T  
0.5895239179411550 0.1680690702866706 0.3016226459146661 T T T  
0.8396502539442878 0.1684073142308008 0.3018424028658884 T T T  
0.0884765137821424 0.4182055307556213 0.3019014493964407 T T T  
0.3376231813297768 0.4160209797849158 0.3006270747181194 T T T  
0.5904398458836410 0.4160673305572247 0.3012195341561340 T T T  
0.8396577698247798 0.4178349855005116 0.3016924460575648 T T T  
0.0893157274935724 0.6680314916035622 0.3018373255622828 T T T  
0.3378042073592168 0.6692082377151211 0.3012248734037555 T T T  
0.5911418082089898 0.6693833570734681 0.3031979312799204 T T T  
0.8417775037575690 0.6684162146863327 0.3017694695690161 T T T  
0.0898838707319915 0.9182787326988472 0.3021977535220904 T T T  
0.3391949329816697 0.9183179530706642 0.3020281350278615 T T T  
0.5892406462225457 0.9198614467693526 0.3017185097854436 T T T  
0.8415934717314573 0.9201924376393210 0.3018739006729143 T T T  
0.1710026830975671 0.0844458032284792 0.2252770483956298 T T T  
0.4213960006061776 0.0844825469274718 0.2249998151882830 T T T  
0.6715848027909370 0.0843962329658753 0.2249874415539198 T T T  
0.9211063434197411 0.0844469761949969 0.2250901938756207 T T T  
0.1711371773201406 0.3344738082618942 0.2251765343001695 T T T  
0.4213159260098252 0.3339532420053902 0.2250766508887534 T T T  
0.6716565400247044 0.3341372928668778 0.2246208188214134 T T T  
0.9212121920566487 0.3341922368650690 0.2250513462757214 T T T  
0.1707723982154344 0.5840942601543423 0.2249109755616432 T T T  
0.4218367786613271 0.5850983693308875 0.2257491998009095 T T T  
0.6712825261518719 0.5845285336430980 0.2260234510200416 T T T  
0.9211462371069173 0.5840700595327446 0.2249088961557900 T T T  
0.1711792486165548 0.8344875959828737 0.2251976532997941 T T T  
0.4211803090632277 0.8349640724487329 0.2250752326435947 T T T  
0.6707651973832304 0.8335911215216870 0.2263511056387553 T T T  
0.9215689255350064 0.8346609229585360 0.2254363831528953 T T T



0.0033938310851985 0.0006358665409946 0.1508635934398241 T T T  
0.2533313543728822 0.0006354202380013 0.1506930501085294 T T T  
0.5034177299429368 0.0009302923668196 0.1506812920216231 T T T  
0.7525916728569353 0.9991615016059674 0.1508999141788269 T T T  
0.0038428858816657 0.2507740664907075 0.1508320111858565 T T T  
0.2533120494110410 0.2506492043658265 0.1507952335290020 T T T  
0.5030653284046073 0.2509726192767204 0.1505709460205305 T T T  
0.7534205150502037 0.2504320286409942 0.1505759854683921 T T T  
0.0031965349436393 0.5005578769654240 0.1506258737218795 T T T  
0.2544830395828826 0.5015626162843102 0.1507433923021355 T T T  
0.5036037121268300 0.5010835783066780 0.1511281351193762 T T T  
0.7528755087160642 0.5014152455811566 0.1507050970991728 T T T  
0.0033620399070311 0.7508661023730643 0.1507804004396176 T T T  
0.2533444893058299 0.7509490727997934 0.1506933361131172 T T T  
0.5034864542820137 0.7506668898591359 0.1510920316253640 T T T  
0.7533088032782301 0.7507483538060626 0.1513723614035130 T T T  
0.0850721534895680 0.1669082185851836 0.0764290804972428 T T T  
0.3352425946141083 0.1669550168502191 0.0763327475842658 T T T  
0.5855205068969852 0.1669825021721815 0.0763216125499294 T T T  
0.8352028382534571 0.1669799222290746 0.0764312818870844 T T T  
0.0850035059978437 0.4167938186212591 0.0764265525563686 T T T  
0.3352674269009949 0.4171104404139601 0.0764940247022875 T T T  
0.5853206485517853 0.4171317472883921 0.0763882209749121 T T T  
0.8353354497780915 0.4168739920020872 0.0763463197410719 T T T  
0.0851733592104936 0.6669504868679402 0.0763734580467681 T T T  
0.3352711565301866 0.6671074084613651 0.0763716714625728 T T T  
0.5853284145728607 0.6672356395815143 0.0766597842950527 T T T  
0.8352486473014525 0.6671030906643090 0.0764483770571853 T T T  
0.0851807286546662 0.9169762854237453 0.0763871956722546 T T T  
0.3352850852639074 0.9171176792626324 0.0763176551671161 T T T  
0.5854290033296345 0.9172147652923625 0.0764387751405843 T T T  
0.8351516471703500 0.9169508308154194 0.0765381953787403 T T T  
0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.0000000000000000 F F F