

Supporting Information

First Principles Modeling of Polymer Encapsulant Degradation in Si Photovoltaic Modules

Arun Mannodi-Kanakkithodi^a, Rishi E. Kumar^b, David P. Fenning^b, and Maria K.Y. Chan^a

^a Center for Nanoscale Materials, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, USA

^b Department of NanoEngineering, University of California San Diego, San Diego, CA, USA

Cif files: Norrish I deacetylation mechanism

Structure 1:

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O '
_cell_length_a              22.340446
_cell_length_b              22.000000
_cell_length_c              10.278996
_cell_angle_alpha           67.142311
_cell_angle_beta            84.730064
_cell_angle_gamma           84.778366
_cell_volume                 4627.186006
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
```

_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_adp_type	_atom_site_U_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0	0.407777	0.244503	0.425153	Uiso	? C
C2	1.0	0.402589	0.210837	0.909920	Uiso	? C
C3	1.0	0.416793	0.427321	0.877551	Uiso	? C
C4	1.0	0.433259	0.312789	0.369521	Uiso	? C
C5	1.0	0.450725	0.183764	0.448151	Uiso	? C
C6	1.0	0.450298	0.154946	0.949355	Uiso	? C
C7	1.0	0.469990	0.379532	0.933225	Uiso	? C
C8	1.0	0.480808	0.317935	0.460115	Uiso	? C
C9	1.0	0.555905	0.139675	0.194188	Uiso	? C
C10	1.0	0.554865	0.141672	0.443013	Uiso	? C
C11	1.0	0.557849	0.130261	0.702186	Uiso	? C
C12	1.0	0.558373	0.131609	0.951213	Uiso	? C
C13	1.0	0.578131	0.360116	0.655257	Uiso	? C
C14	1.0	0.579019	0.365220	0.900067	Uiso	? C
C15	1.0	0.582548	0.360922	0.151957	Uiso	? C
C16	1.0	0.582789	0.354180	0.407265	Uiso	? C
C17	1.0	0.591775	0.147743	0.305999	Uiso	? C
C18	1.0	0.592673	0.142649	0.559352	Uiso	? C
C19	1.0	0.593565	0.144331	0.058374	Uiso	? C
C20	1.0	0.594298	0.140046	0.811376	Uiso	? C
C21	1.0	0.605371	0.384897	0.502608	Uiso	? C
C22	1.0	0.611679	0.380435	0.754338	Uiso	? C
C23	1.0	0.614548	0.379551	0.004641	Uiso	? C
C24	1.0	0.614139	0.378800	0.257600	Uiso	? C
H1	1.0	0.359923	0.192004	0.902156	Uiso	? H
H2	1.0	0.382460	0.234230	0.527579	Uiso	? H
H3	1.0	0.375153	0.243603	0.352049	Uiso	? H
H4	1.0	0.397255	0.231409	0.992493	Uiso	? H
H5	1.0	0.390891	0.407474	0.818608	Uiso	? H
H6	1.0	0.387191	0.429997	0.966689	Uiso	? H
H7	1.0	0.396295	0.350174	0.365645	Uiso	? H
H8	1.0	0.416303	0.250494	0.810164	Uiso	? H
H9	1.0	0.430393	0.476638	0.808096	Uiso	? H
H10	1.0	0.452551	0.326009	0.260663	Uiso	? H
H11	1.0	0.518642	0.177843	0.166547	Uiso	? H
H12	1.0	0.517725	0.164540	0.684840	Uiso	? H
H13	1.0	0.530806	0.378908	0.654875	Uiso	? H
H14	1.0	0.529712	0.096572	0.482120	Uiso	? H
H15	1.0	0.537421	0.385964	0.140963	Uiso	? H
H16	1.0	0.535041	0.091701	0.240254	Uiso	? H
H17	1.0	0.541622	0.079965	0.745469	Uiso	? H
H18	1.0	0.540834	0.081969	0.999284	Uiso	? H
H19	1.0	0.565976	0.313651	0.946490	Uiso	? H
H20	1.0	0.575224	0.307636	0.196567	Uiso	? H
H21	1.0	0.576720	0.305963	0.697701	Uiso	? H
H22	1.0	0.589546	0.299985	0.458022	Uiso	? H
H23	1.0	0.612791	0.195734	0.262160	Uiso	? H
H24	1.0	0.612115	0.193569	0.007416	Uiso	? H
H25	1.0	0.611711	0.189933	0.766030	Uiso	? H
H26	1.0	0.613598	0.190607	0.521327	Uiso	? H
H27	1.0	0.623949	0.432382	0.959889	Uiso	? H
H28	1.0	0.616759	0.432900	0.218283	Uiso	? H
H29	1.0	0.598634	0.439164	0.452433	Uiso	? H
H30	1.0	0.619193	0.433744	0.706494	Uiso	? H
H31	1.0	0.630199	0.104937	0.571981	Uiso	? H
H32	1.0	0.629220	0.109555	0.334884	Uiso	? H
H33	1.0	0.632644	0.108141	0.084001	Uiso	? H
H34	1.0	0.634055	0.104773	0.836035	Uiso	? H
H35	1.0	0.656668	0.354428	0.770190	Uiso	? H
H36	1.0	0.658606	0.351742	0.011291	Uiso	? H
H37	1.0	0.654654	0.373942	0.502827	Uiso	? H
H38	1.0	0.660982	0.357586	0.267144	Uiso	? H
O1	1.0	0.432736	0.128092	0.496860	Uiso	? O

O2	1.0	0.440829	0.096253	0.002416	Uiso	? O
O3	1.0	0.465795	0.322867	0.019401	Uiso	? O
O4	1.0	0.486670	0.281247	0.583151	Uiso	? O
O5	1.0	0.506353	0.179070	0.918983	Uiso	? O
O6	1.0	0.509501	0.197796	0.410154	Uiso	? O
O7	1.0	0.517905	0.367736	0.385913	Uiso	? O
O8	1.0	0.522764	0.407393	0.874006	Uiso	? O

Structure 2:

```
#####
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O  '
_cell_length_a             22.340446
_cell_length_b             22.000000
_cell_length_c             10.278996
_cell_angle_alpha          67.142311
_cell_angle_beta           84.730064
_cell_angle_gamma          84.778366
_cell_volume               4627.186006
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.408649  0.233606  0.460034  Uiso  ? C
C2      1.0  0.403145  0.215359  0.912786  Uiso  ? C
C3      1.0  0.363970  0.466527  0.868257  Uiso  ? C
C4      1.0  0.436182  0.300379  0.383705  Uiso  ? C
C5      1.0  0.447996  0.170804  0.479042  Uiso  ? C
C6      1.0  0.446055  0.154987  0.960074  Uiso  ? C
C7      1.0  0.418769  0.419463  0.908316  Uiso  ? C
C8      1.0  0.489275  0.309562  0.454593  Uiso  ? C
C9      1.0  0.551592  0.122927  0.214055  Uiso  ? C
C10     1.0  0.550557  0.126274  0.461361  Uiso  ? C
C11     1.0  0.553146  0.116561  0.719596  Uiso  ? C
C12     1.0  0.552639  0.121164  0.965583  Uiso  ? C
C13     1.0  0.581549  0.363697  0.641858  Uiso  ? C
C14     1.0  0.611553  0.367395  0.872683  Uiso  ? C
C15     1.0  0.597138  0.365364  0.127378  Uiso  ? C
C16     1.0  0.584010  0.364695  0.383767  Uiso  ? C
C17     1.0  0.587436  0.132105  0.324600  Uiso  ? C
C18     1.0  0.588139  0.128348  0.577128  Uiso  ? C
C19     1.0  0.588653  0.129823  0.076342  Uiso  ? C
C20     1.0  0.589292  0.127398  0.827906  Uiso  ? C
C21     1.0  0.596065  0.400864  0.480662  Uiso  ? C
C22     1.0  0.595537  0.398008  0.737627  Uiso  ? C
C23     1.0  0.624708  0.399106  0.973586  Uiso  ? C
C24     1.0  0.610974  0.397690  0.230134  Uiso  ? C
H1      1.0  0.356953  0.200055  0.926810  Uiso  ? H
H2      1.0  0.391230  0.227647  0.567723  Uiso  ? H
H3      1.0  0.369396  0.231459  0.405036  Uiso  ? H
```

H4	1.0	0.407718	0.245479	0.974879	Uiso	? H
H5	1.0	0.336852	0.451049	0.803673	Uiso	? H
H6	1.0	0.336516	0.463872	0.963990	Uiso	? H
H7	1.0	0.401588	0.340277	0.378124	Uiso	? H
H8	1.0	0.414476	0.246172	0.801546	Uiso	? H
H9	1.0	0.376355	0.517249	0.805803	Uiso	? H
H10	1.0	0.450246	0.308856	0.273065	Uiso	? H
H11	1.0	0.512996	0.159503	0.189460	Uiso	? H
H12	1.0	0.512952	0.150738	0.701399	Uiso	? H
H13	1.0	0.533224	0.354727	0.657320	Uiso	? H
H14	1.0	0.525300	0.081202	0.501453	Uiso	? H
H15	1.0	0.548036	0.365261	0.124877	Uiso	? H
H16	1.0	0.532411	0.074015	0.259886	Uiso	? H
H17	1.0	0.537058	0.066181	0.764153	Uiso	? H
H18	1.0	0.531236	0.073550	0.011299	Uiso	? H
H19	1.0	0.617056	0.313130	0.915508	Uiso	? H
H20	1.0	0.613780	0.312942	0.169537	Uiso	? H
H21	1.0	0.604454	0.313979	0.677609	Uiso	? H
H22	1.0	0.601599	0.312765	0.431232	Uiso	? H
H23	1.0	0.607469	0.180656	0.279538	Uiso	? H
H24	1.0	0.608020	0.178725	0.029608	Uiso	? H
H25	1.0	0.607220	0.177001	0.780712	Uiso	? H
H26	1.0	0.608244	0.176773	0.537851	Uiso	? H
H27	1.0	0.609751	0.451972	0.930206	Uiso	? H
H28	1.0	0.594275	0.450063	0.188399	Uiso	? H
H29	1.0	0.570616	0.449279	0.443343	Uiso	? H
H30	1.0	0.501430	0.409568	0.843607	Uiso	? H
H31	1.0	0.626025	0.090946	0.590871	Uiso	? H
H32	1.0	0.625486	0.094681	0.353151	Uiso	? H
H33	1.0	0.627113	0.092799	0.098800	Uiso	? H
H34	1.0	0.628569	0.091545	0.855447	Uiso	? H
H35	1.0	0.590038	0.452279	0.693312	Uiso	? H
H36	1.0	0.674142	0.397381	0.978073	Uiso	? H
H37	1.0	0.644146	0.411400	0.461779	Uiso	? H
H38	1.0	0.660133	0.397494	0.234741	Uiso	? H
O1	1.0	0.428747	0.115892	0.537791	Uiso	? O
O2	1.0	0.431543	0.097983	0.017342	Uiso	? O
O3	1.0	0.420686	0.366670	0.009811	Uiso	? O
O4	1.0	0.503920	0.274011	0.573119	Uiso	? O
O5	1.0	0.504137	0.173209	0.929781	Uiso	? O
O6	1.0	0.505741	0.182727	0.426050	Uiso	? O
O7	1.0	0.519560	0.362949	0.367132	Uiso	? O
O8	1.0	0.466714	0.442268	0.815739	Uiso	? O

Structure 3:

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O'
_cell_length_a              22.340446
_cell_length_b              22.000000
_cell_length_c              10.278996
_cell_angle_alpha           67.142311
_cell_angle_beta            84.730064
_cell_angle_gamma           84.778366
_cell_volume                 4627.186006
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_

```

	_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_adp_type	_atom_site_U_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0	0.407075	0.232460	0.471096	Uiso	? C		
C2	1.0	0.402025	0.215193	0.914477	Uiso	? C		
C3	1.0	0.378949	0.460349	0.858226	Uiso	? C		
C4	1.0	0.432057	0.300254	0.389982	Uiso	? C		
C5	1.0	0.447334	0.171092	0.483334	Uiso	? C		
C6	1.0	0.445874	0.155639	0.958900	Uiso	? C		
C7	1.0	0.408582	0.394270	0.941958	Uiso	? C		
C8	1.0	0.486157	0.312569	0.453089	Uiso	? C		
C9	1.0	0.551523	0.125751	0.217172	Uiso	? C		
C10	1.0	0.550739	0.129179	0.464677	Uiso	? C		
C11	1.0	0.553265	0.120571	0.721595	Uiso	? C		
C12	1.0	0.552809	0.123767	0.968765	Uiso	? C		
C13	1.0	0.605529	0.362497	0.621520	Uiso	? C		
C14	1.0	0.600281	0.369306	0.871760	Uiso	? C		
C15	1.0	0.593604	0.366809	0.121852	Uiso	? C		
C16	1.0	0.581129	0.366394	0.375045	Uiso	? C		
C17	1.0	0.587202	0.135769	0.326993	Uiso	? C		
C18	1.0	0.588557	0.131326	0.579940	Uiso	? C		
C19	1.0	0.588585	0.132937	0.079266	Uiso	? C		
C20	1.0	0.589523	0.130476	0.830838	Uiso	? C		
C21	1.0	0.588128	0.405348	0.469508	Uiso	? C		
C22	1.0	0.609200	0.400430	0.715951	Uiso	? C		
C23	1.0	0.627733	0.391164	0.975187	Uiso	? C		
C24	1.0	0.610425	0.397563	0.223987	Uiso	? C		
H1	1.0	0.356927	0.199400	0.914867	Uiso	? H		
H2	1.0	0.393160	0.226063	0.580987	Uiso	? H		
H3	1.0	0.366075	0.228904	0.423585	Uiso	? H		
H4	1.0	0.401267	0.240263	0.988759	Uiso	? H		
H5	1.0	0.376531	0.465050	0.748103	Uiso	? H		
H6	1.0	0.333953	0.467260	0.904598	Uiso	? H		
H7	1.0	0.396503	0.338720	0.388422	Uiso	? H		
H8	1.0	0.416321	0.250614	0.809248	Uiso	? H		
H9	1.0	0.407694	0.499478	0.853116	Uiso	? H		
H10	1.0	0.443459	0.308477	0.278518	Uiso	? H		
H11	1.0	0.512445	0.161690	0.192717	Uiso	? H		
H12	1.0	0.513759	0.155790	0.702133	Uiso	? H		
H13	1.0	0.573018	0.324165	0.671523	Uiso	? H		
H14	1.0	0.526069	0.083700	0.504706	Uiso	? H		
H15	1.0	0.545044	0.376961	0.107425	Uiso	? H		
H16	1.0	0.533035	0.076484	0.263542	Uiso	? H		
H17	1.0	0.536006	0.070727	0.765965	Uiso	? H		
H18	1.0	0.532030	0.075790	0.014358	Uiso	? H		
H19	1.0	0.588751	0.317331	0.914952	Uiso	? H		
H20	1.0	0.600479	0.312513	0.171712	Uiso	? H		
H21	1.0	0.649992	0.336692	0.616765	Uiso	? H		
H22	1.0	0.599876	0.315168	0.426834	Uiso	? H		
H23	1.0	0.606488	0.184723	0.281475	Uiso	? H		
H24	1.0	0.607565	0.182050	0.032314	Uiso	? H		
H25	1.0	0.607859	0.179891	0.784701	Uiso	? H		
H26	1.0	0.609287	0.179435	0.539982	Uiso	? H		
H27	1.0	0.627730	0.445538	0.929614	Uiso	? H		
H28	1.0	0.597705	0.451030	0.180682	Uiso	? H		
H29	1.0	0.545493	0.434220	0.472548	Uiso	? H		
H30	1.0	0.453872	0.383239	0.897705	Uiso	? H		
H31	1.0	0.625989	0.093342	0.594796	Uiso	? H		
H32	1.0	0.625824	0.099050	0.354697	Uiso	? H		
H33	1.0	0.627355	0.096308	0.101603	Uiso	? H		
H34	1.0	0.628540	0.094241	0.858008	Uiso	? H		
H35	1.0	0.637028	0.443428	0.672969	Uiso	? H		
H36	1.0	0.675327	0.372335	0.985238	Uiso	? H		
H37	1.0	0.622389	0.441738	0.417202	Uiso	? H		
H38	1.0	0.659617	0.392918	0.233081	Uiso	? H		

O1	1.0	0.429107	0.115560	0.536514	Uiso	? O
O2	1.0	0.432400	0.098174	0.010505	Uiso	? O
O3	1.0	0.386284	0.354093	0.051467	Uiso	? O
O4	1.0	0.500018	0.283388	0.575215	Uiso	? O
O5	1.0	0.503679	0.175073	0.933903	Uiso	? O
O6	1.0	0.505177	0.184874	0.432402	Uiso	? O
O7	1.0	0.518002	0.361221	0.353826	Uiso	? O
O8	1.0	0.553190	0.413348	0.787845	Uiso	? O

Structure 4:

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O '
_cell_length_a             22.340446
_cell_length_b             22.000000
_cell_length_c             10.278996
_cell_angle_alpha          67.142311
_cell_angle_beta           84.730064
_cell_angle_gamma          84.778366
_cell_volume               4627.186006
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.406551  0.243022  0.423286  Uiso  ? C
C2      1.0  0.402302  0.212828  0.910005  Uiso  ? C
C3      1.0  0.316933  0.465476  0.881718  Uiso  ? C
C4      1.0  0.432554  0.311026  0.366936  Uiso  ? C
C5      1.0  0.449197  0.181843  0.449791  Uiso  ? C
C6      1.0  0.448984  0.155895  0.949361  Uiso  ? C
C7      1.0  0.369852  0.418059  0.939918  Uiso  ? C
C8      1.0  0.479533  0.316004  0.458699  Uiso  ? C
C9      1.0  0.555125  0.135508  0.196970  Uiso  ? C
C10     1.0  0.553293  0.139431  0.443940  Uiso  ? C
C11     1.0  0.556169  0.128435  0.703156  Uiso  ? C
C12     1.0  0.556826  0.130187  0.951772  Uiso  ? C
C13     1.0  0.571951  0.357720  0.665280  Uiso  ? C
C14     1.0  0.580627  0.387422  0.885940  Uiso  ? C
C15     1.0  0.583719  0.365760  0.150337  Uiso  ? C
C16     1.0  0.580126  0.355747  0.410638  Uiso  ? C
C17     1.0  0.590693  0.144798  0.307842  Uiso  ? C
C18     1.0  0.590839  0.141507  0.559780  Uiso  ? C
C19     1.0  0.592558  0.141266  0.060224  Uiso  ? C
C20     1.0  0.592654  0.138787  0.811730  Uiso  ? C
C21     1.0  0.601016  0.384375  0.512618  Uiso  ? C
C22     1.0  0.611008  0.359089  0.780359  Uiso  ? C
C23     1.0  0.618569  0.386400  0.004681  Uiso  ? C
C24     1.0  0.611933  0.383855  0.261059  Uiso  ? C
H1      1.0  0.358368  0.194389  0.910592  Uiso  ? H
H2      1.0  0.380775  0.233605  0.524909  Uiso  ? H
H3      1.0  0.374161  0.242164  0.349658  Uiso  ? H
```

H4	1.0	0.399968	0.236414	0.987265	Uiso ? H
H5	1.0	0.297507	0.451158	0.803626	Uiso ? H
H6	1.0	0.282076	0.463055	0.965705	Uiso ? H
H7	1.0	0.395778	0.348895	0.360203	Uiso ? H
H8	1.0	0.414829	0.250164	0.805778	Uiso ? H
H9	1.0	0.330965	0.516200	0.825072	Uiso ? H
H10	1.0	0.452158	0.324312	0.258317	Uiso ? H
H11	1.0	0.516965	0.172585	0.170478	Uiso ? H
H12	1.0	0.515585	0.161997	0.686573	Uiso ? H
H13	1.0	0.529096	0.385942	0.669468	Uiso ? H
H14	1.0	0.528331	0.094187	0.484123	Uiso ? H
H15	1.0	0.538187	0.389594	0.133767	Uiso ? H
H16	1.0	0.535420	0.086908	0.243436	Uiso ? H
H17	1.0	0.540822	0.077766	0.746534	Uiso ? H
H18	1.0	0.538419	0.080967	0.998494	Uiso ? H
H19	1.0	0.628714	0.308705	0.844762	Uiso ? H
H20	1.0	0.578339	0.312088	0.192231	Uiso ? H
H21	1.0	0.559642	0.306865	0.692825	Uiso ? H
H22	1.0	0.588604	0.301618	0.457106	Uiso ? H
H23	1.0	0.611203	0.193073	0.262791	Uiso ? H
H24	1.0	0.611276	0.190464	0.011161	Uiso ? H
H25	1.0	0.609640	0.188859	0.766078	Uiso ? H
H26	1.0	0.610651	0.190071	0.521249	Uiso ? H
H27	1.0	0.631972	0.437685	0.971511	Uiso ? H
H28	1.0	0.611352	0.438139	0.224709	Uiso ? H
H29	1.0	0.594958	0.438738	0.465265	Uiso ? H
H30	1.0	0.413492	0.428683	0.875467	Uiso ? H
H31	1.0	0.629070	0.104615	0.572161	Uiso ? H
H32	1.0	0.628384	0.106984	0.337701	Uiso ? H
H33	1.0	0.631434	0.104802	0.084376	Uiso ? H
H34	1.0	0.632616	0.103802	0.836107	Uiso ? H
H35	1.0	0.652016	0.386496	0.735153	Uiso ? H
H36	1.0	0.660533	0.355505	0.008513	Uiso ? H
H37	1.0	0.650151	0.372678	0.515128	Uiso ? H
H38	1.0	0.659648	0.365701	0.270909	Uiso ? H
O1	1.0	0.431392	0.126126	0.503508	Uiso ? O
O2	1.0	0.438543	0.097484	0.000659	Uiso ? O
O3	1.0	0.366843	0.369500	0.050725	Uiso ? O
O4	1.0	0.486154	0.277731	0.580362	Uiso ? O
O5	1.0	0.505605	0.178786	0.920440	Uiso ? O
O6	1.0	0.507949	0.195516	0.408140	Uiso ? O
O7	1.0	0.515431	0.367355	0.387528	Uiso ? O
O8	1.0	0.528752	0.411570	0.876374	Uiso ? O

Cif files: Norrish II deacetylation mechanism

Structure 1:

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O  '
_cell_length_a             22.340446
_cell_length_b             22.000000
_cell_length_c             10.278996
_cell_angle_alpha          67.142311
_cell_angle_beta           84.730064
_cell_angle_gamma          84.778366
_cell_volume               4627.186006
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_adp_type
  _atom_site_U_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
  C1      1.0  0.407766  0.244477  0.425261  Uiso ? C
  C2      1.0  0.402578  0.210838  0.909911  Uiso ? C
  C3      1.0  0.416792  0.427362  0.877583  Uiso ? C
  C4      1.0  0.433272  0.312760  0.369544  Uiso ? C
  C5      1.0  0.450704  0.183726  0.448222  Uiso ? C
  C6      1.0  0.450281  0.154933  0.949353  Uiso ? C
  C7      1.0  0.469993  0.379566  0.933213  Uiso ? C
  C8      1.0  0.480827  0.317918  0.460133  Uiso ? C
  C9      1.0  0.555856  0.139627  0.194229  Uiso ? C
  C10     1.0  0.554823  0.141615  0.443062  Uiso ? C
  C11     1.0  0.557799  0.130229  0.702228  Uiso ? C
  C12     1.0  0.558339  0.131566  0.951249  Uiso ? C
  C13     1.0  0.578114  0.360121  0.655237  Uiso ? C
  C14     1.0  0.579006  0.365230  0.900029  Uiso ? C
  C15     1.0  0.582541  0.360906  0.151933  Uiso ? C
  C16     1.0  0.582788  0.354191  0.407233  Uiso ? C
  C17     1.0  0.591802  0.147715  0.306011  Uiso ? C
  C18     1.0  0.592697  0.142636  0.559349  Uiso ? C
  C19     1.0  0.593589  0.144309  0.058381  Uiso ? C
  C20     1.0  0.594323  0.140038  0.811384  Uiso ? C
  C21     1.0  0.605408  0.384968  0.502500  Uiso ? C
  C22     1.0  0.611705  0.380511  0.754238  Uiso ? C
  C23     1.0  0.614599  0.379598  0.004551  Uiso ? C
  C24     1.0  0.614162  0.378867  0.257513  Uiso ? C
  H1      1.0  0.359889  0.191991  0.902333  Uiso ? H
  H2      1.0  0.382481  0.234213  0.527734  Uiso ? H
  H3      1.0  0.375113  0.243574  0.352209  Uiso ? H
  H4      1.0  0.397316  0.231479  0.992385  Uiso ? H
  H5      1.0  0.390892  0.407533  0.818592  Uiso ? H
  H6      1.0  0.387192  0.430005  0.966766  Uiso ? H
  H7      1.0  0.396314  0.350165  0.365642  Uiso ? H
  H8      1.0  0.416274  0.250453  0.810044  Uiso ? H
  H9      1.0  0.430397  0.476689  0.808181  Uiso ? H
```

H10	1.0	0.452567	0.325954	0.260685	Uiso	? H
H11	1.0	0.518610	0.177826	0.166553	Uiso	? H
H12	1.0	0.517695	0.164537	0.684861	Uiso	? H
H13	1.0	0.530786	0.378921	0.654831	Uiso	? H
H14	1.0	0.529705	0.096519	0.482164	Uiso	? H
H15	1.0	0.537410	0.385948	0.140950	Uiso	? H
H16	1.0	0.535040	0.091631	0.240316	Uiso	? H
H17	1.0	0.541623	0.079909	0.745508	Uiso	? H
H18	1.0	0.540821	0.081933	0.999306	Uiso	? H
H19	1.0	0.565995	0.313666	0.946440	Uiso	? H
H20	1.0	0.575299	0.307604	0.196542	Uiso	? H
H21	1.0	0.576771	0.305968	0.697697	Uiso	? H
H22	1.0	0.589582	0.300009	0.457973	Uiso	? H
H23	1.0	0.612773	0.195727	0.262170	Uiso	? H
H24	1.0	0.612100	0.193562	0.007425	Uiso	? H
H25	1.0	0.611691	0.189941	0.766032	Uiso	? H
H26	1.0	0.613573	0.190616	0.521305	Uiso	? H
H27	1.0	0.623931	0.432447	0.959828	Uiso	? H
H28	1.0	0.616723	0.432965	0.218180	Uiso	? H
H29	1.0	0.598590	0.439229	0.452355	Uiso	? H
H30	1.0	0.619162	0.433826	0.706411	Uiso	? H
H31	1.0	0.630206	0.104896	0.572019	Uiso	? H
H32	1.0	0.629225	0.109496	0.334922	Uiso	? H
H33	1.0	0.632646	0.108085	0.084049	Uiso	? H
H34	1.0	0.634063	0.104734	0.836058	Uiso	? H
H35	1.0	0.656691	0.354481	0.770099	Uiso	? H
H36	1.0	0.658649	0.351775	0.011218	Uiso	? H
H37	1.0	0.654687	0.374002	0.502757	Uiso	? H
H38	1.0	0.661009	0.357637	0.267121	Uiso	? H
O1	1.0	0.432719	0.128050	0.496931	Uiso	? O
O2	1.0	0.440813	0.096236	0.002412	Uiso	? O
O3	1.0	0.465807	0.322873	0.019361	Uiso	? O
O4	1.0	0.486713	0.281217	0.583161	Uiso	? O
O5	1.0	0.506339	0.179062	0.918966	Uiso	? O
O6	1.0	0.509480	0.197768	0.410187	Uiso	? O
O7	1.0	0.517896	0.367757	0.385930	Uiso	? O
O8	1.0	0.522762	0.407436	0.874015	Uiso	? O

Structure 2:

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O'
_cell_length_a              22.340446
_cell_length_b              22.000000
_cell_length_c              10.278996
_cell_angle_alpha           67.142311
_cell_angle_beta            84.730064
_cell_angle_gamma           84.778366
_cell_volume                 4627.186006
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
```

_atom_site_adp_type	_atom_site_U_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol			
C1	1.0	0.406214	0.234087	0.476814	Uiso ? C
C2	1.0	0.397753	0.206042	0.936430	Uiso ? C
C3	1.0	0.412711	0.402236	0.821822	Uiso ? C
C4	1.0	0.431964	0.301103	0.391829	Uiso ? C
C5	1.0	0.446685	0.171886	0.497102	Uiso ? C
C6	1.0	0.444199	0.149051	0.985103	Uiso ? C
C7	1.0	0.468539	0.373463	0.902372	Uiso ? C
C8	1.0	0.484424	0.315453	0.457186	Uiso ? C
C9	1.0	0.549991	0.127459	0.225506	Uiso ? C
C10	1.0	0.549658	0.129753	0.473774	Uiso ? C
C11	1.0	0.552690	0.120369	0.731376	Uiso ? C
C12	1.0	0.552027	0.123067	0.978679	Uiso ? C
C13	1.0	0.589789	0.373052	0.625293	Uiso ? C
C14	1.0	0.577716	0.387542	0.863298	Uiso ? C
C15	1.0	0.580783	0.379952	0.118635	Uiso ? C
C16	1.0	0.575584	0.376897	0.372856	Uiso ? C
C17	1.0	0.585961	0.136882	0.335620	Uiso ? C
C18	1.0	0.587420	0.132579	0.588512	Uiso ? C
C19	1.0	0.586942	0.134937	0.087311	Uiso ? C
C20	1.0	0.588565	0.131533	0.839638	Uiso ? C
C21	1.0	0.587026	0.414535	0.465977	Uiso ? C
C22	1.0	0.607507	0.411346	0.712574	Uiso ? C
C23	1.0	0.604455	0.412834	0.963714	Uiso ? C
C24	1.0	0.599087	0.411341	0.217835	Uiso ? C
H1	1.0	0.352627	0.187501	0.962949	Uiso ? H
H2	1.0	0.390716	0.230065	0.584452	Uiso ? H
H3	1.0	0.366022	0.229218	0.428113	Uiso ? H
H4	1.0	0.403752	0.240584	0.987297	Uiso ? H
H5	1.0	0.372165	0.383113	0.888285	Uiso ? H
H6	1.0	0.410544	0.456396	0.779042	Uiso ? H
H7	1.0	0.396422	0.340746	0.380301	Uiso ? H
H8	1.0	0.404808	0.233446	0.821778	Uiso ? H
H9	1.0	0.415818	0.386756	0.731639	Uiso ? H
H10	1.0	0.446926	0.305804	0.283539	Uiso ? H
H11	1.0	0.511208	0.163769	0.201403	Uiso ? H
H12	1.0	0.512241	0.154168	0.713816	Uiso ? H
H13	1.0	0.546012	0.351908	0.666399	Uiso ? H
H14	1.0	0.525425	0.083960	0.514280	Uiso ? H
H15	1.0	0.531460	0.381288	0.122909	Uiso ? H
H16	1.0	0.531277	0.078302	0.271340	Uiso ? H
H17	1.0	0.536956	0.069817	0.775858	Uiso ? H
H18	1.0	0.533785	0.073760	0.025841	Uiso ? H
H19	1.0	0.577440	0.333179	0.911238	Uiso ? H
H20	1.0	0.595766	0.327033	0.159054	Uiso ? H
H21	1.0	0.622028	0.330171	0.640509	Uiso ? H
H22	1.0	0.596176	0.326104	0.418020	Uiso ? H
H23	1.0	0.605168	0.185869	0.290883	Uiso ? H
H24	1.0	0.604204	0.184843	0.038580	Uiso ? H
H25	1.0	0.605037	0.181820	0.793502	Uiso ? H
H26	1.0	0.606845	0.181368	0.548721	Uiso ? H
H27	1.0	0.595489	0.466909	0.925041	Uiso ? H
H28	1.0	0.582572	0.463791	0.179621	Uiso ? H
H29	1.0	0.552035	0.455173	0.448184	Uiso ? H
H30	1.0	0.593780	0.464249	0.660907	Uiso ? H
H31	1.0	0.625722	0.095700	0.601633	Uiso ? H
H32	1.0	0.624581	0.100127	0.362558	Uiso ? H
H33	1.0	0.626770	0.099703	0.109763	Uiso ? H
H34	1.0	0.628724	0.096874	0.865242	Uiso ? H
H35	1.0	0.656732	0.408340	0.718063	Uiso ? H
H36	1.0	0.653829	0.404156	0.954888	Uiso ? H
H37	1.0	0.629971	0.438424	0.425141	Uiso ? H
H38	1.0	0.648551	0.410840	0.216850	Uiso ? H
O1	1.0	0.428691	0.116561	0.559614	Uiso ? O
O2	1.0	0.433442	0.091330	0.052262	Uiso ? O
O3	1.0	0.472445	0.321184	0.004808	Uiso ? O
O4	1.0	0.501155	0.282487	0.575460	Uiso ? O
O5	1.0	0.500592	0.171394	0.943713	Uiso ? O

O6	1.0	0.503695	0.185080	0.440601	Uiso ? O
O7	1.0	0.511232	0.370221	0.364623	Uiso ? O
O8	1.0	0.514683	0.413290	0.840054	Uiso ? O

Structure 3:

```

=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O  '
_cell_length_a              22.340446
_cell_length_b              22.000000
_cell_length_c              10.278996
_cell_angle_alpha           67.142311
_cell_angle_beta            84.730064
_cell_angle_gamma           84.778366
_cell_volume                4627.186006
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_adp_type
  _atom_site_U_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.410001  0.238528  0.462951  Uiso ? C
C2      1.0  0.404695  0.221433  0.916732  Uiso ? C
C3      1.0  0.371106  0.430169  0.809511  Uiso ? C
C4      1.0  0.439039  0.304113  0.383031  Uiso ? C
C5      1.0  0.448013  0.174455  0.486303  Uiso ? C
C6      1.0  0.445764  0.159646  0.968412  Uiso ? C
C7      1.0  0.431201  0.406991  0.874020  Uiso ? C
C8      1.0  0.491920  0.313804  0.454126  Uiso ? C
C9      1.0  0.550217  0.123403  0.223247  Uiso ? C
C10     1.0  0.549331  0.126657  0.470637  Uiso ? C
C11     1.0  0.551577  0.117853  0.728207  Uiso ? C
C12     1.0  0.551311  0.121617  0.974679  Uiso ? C
C13     1.0  0.592095  0.364322  0.640741  Uiso ? C
C14     1.0  0.614479  0.368520  0.876664  Uiso ? C
C15     1.0  0.598803  0.369927  0.126362  Uiso ? C
C16     1.0  0.586977  0.368502  0.382570  Uiso ? C
C17     1.0  0.586434  0.131158  0.334863  Uiso ? C
C18     1.0  0.587071  0.127706  0.587176  Uiso ? C
C19     1.0  0.587602  0.128794  0.086776  Uiso ? C
C20     1.0  0.588345  0.126432  0.838232  Uiso ? C
C21     1.0  0.598567  0.404858  0.479292  Uiso ? C
C22     1.0  0.607540  0.398950  0.734618  Uiso ? C
C23     1.0  0.630610  0.399257  0.976357  Uiso ? C
C24     1.0  0.614229  0.401216  0.229384  Uiso ? C
H1      1.0  0.357881  0.207888  0.933659  Uiso ? H
H2      1.0  0.392675  0.234501  0.569523  Uiso ? H
H3      1.0  0.370531  0.236357  0.408674  Uiso ? H
H4      1.0  0.411600  0.253127  0.973851  Uiso ? H
H5      1.0  0.346801  0.386962  0.822211  Uiso ? H
H6      1.0  0.344273  0.457043  0.867222  Uiso ? H
H7      1.0  0.405172  0.345223  0.372379  Uiso ? H
H8      1.0  0.416070  0.249698  0.804128  Uiso ? H

```

H9	1.0	0.376473	0.462482	0.697805	Uiso	? H
H10	1.0	0.454079	0.310192	0.274061	Uiso	? H
H11	1.0	0.512794	0.161444	0.197196	Uiso	? H
H12	1.0	0.512934	0.154188	0.708157	Uiso	? H
H13	1.0	0.545733	0.348546	0.668634	Uiso	? H
H14	1.0	0.522907	0.082490	0.510540	Uiso	? H
H15	1.0	0.549777	0.374791	0.117306	Uiso	? H
H16	1.0	0.529348	0.075424	0.268615	Uiso	? H
H17	1.0	0.533049	0.068628	0.772150	Uiso	? H
H18	1.0	0.528343	0.075000	0.019818	Uiso	? H
H19	1.0	0.609074	0.315147	0.924886	Uiso	? H
H20	1.0	0.610771	0.316287	0.172218	Uiso	? H
H21	1.0	0.620178	0.317789	0.665731	Uiso	? H
H22	1.0	0.604655	0.316620	0.430149	Uiso	? H
H23	1.0	0.608030	0.178796	0.290308	Uiso	? H
H24	1.0	0.608691	0.176731	0.040547	Uiso	? H
H25	1.0	0.608420	0.174915	0.792172	Uiso	? H
H26	1.0	0.608876	0.175152	0.547670	Uiso	? H
H27	1.0	0.621441	0.453320	0.929580	Uiso	? H
H28	1.0	0.599126	0.454083	0.188047	Uiso	? H
H29	1.0	0.568289	0.449949	0.450928	Uiso	? H
H30	1.0	0.515549	0.420492	0.829120	Uiso	? H
H31	1.0	0.623701	0.088771	0.602942	Uiso	? H
H32	1.0	0.623346	0.092365	0.364724	Uiso	? H
H33	1.0	0.624852	0.090284	0.110744	Uiso	? H
H34	1.0	0.626139	0.088663	0.867205	Uiso	? H
H35	1.0	0.612810	0.452298	0.684418	Uiso	? H
H36	1.0	0.679820	0.391357	0.987276	Uiso	? H
H37	1.0	0.644719	0.421767	0.450307	Uiso	? H
H38	1.0	0.663512	0.399130	0.234749	Uiso	? H
O1	1.0	0.427510	0.120230	0.547992	Uiso	? O
O2	1.0	0.429363	0.103476	0.030259	Uiso	? O
O3	1.0	0.438654	0.362802	0.990275	Uiso	? O
O4	1.0	0.505903	0.279112	0.573804	Uiso	? O
O5	1.0	0.504470	0.175436	0.936382	Uiso	? O
O6	1.0	0.505964	0.184415	0.433441	Uiso	? O
O7	1.0	0.522607	0.366400	0.365304	Uiso	? O
O8	1.0	0.476601	0.440892	0.787820	Uiso	? O

Structure 4:

```

#####
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O'
_cell_length_a              22.340446
_cell_length_b              22.000000
_cell_length_c              10.278996
_cell_angle_alpha           67.142311
_cell_angle_beta            84.730064
_cell_angle_gamma           84.778366
_cell_volume                 4627.186006
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z

```

_atom_site_adp_type	_atom_site_U_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol				
C1	1.0	0.407417	0.244009	0.425519	Uiso	? C
C2	1.0	0.402175	0.211235	0.909992	Uiso	? C
C3	1.0	0.321717	0.467823	0.875143	Uiso	? C
C4	1.0	0.433109	0.312171	0.368365	Uiso	? C
C5	1.0	0.450115	0.183234	0.449083	Uiso	? C
C6	1.0	0.449685	0.155233	0.949179	Uiso	? C
C7	1.0	0.372546	0.417722	0.937487	Uiso	? C
C8	1.0	0.480755	0.317380	0.458322	Uiso	? C
C9	1.0	0.555736	0.138308	0.195354	Uiso	? C
C10	1.0	0.554580	0.140394	0.443867	Uiso	? C
C11	1.0	0.557287	0.129620	0.702753	Uiso	? C
C12	1.0	0.558210	0.130805	0.952051	Uiso	? C
C13	1.0	0.578777	0.354771	0.660501	Uiso	? C
C14	1.0	0.589740	0.363330	0.896675	Uiso	? C
C15	1.0	0.585932	0.359231	0.149927	Uiso	? C
C16	1.0	0.582828	0.354132	0.407089	Uiso	? C
C17	1.0	0.591526	0.146733	0.306883	Uiso	? C
C18	1.0	0.592108	0.142196	0.559760	Uiso	? C
C19	1.0	0.593260	0.143851	0.058815	Uiso	? C
C20	1.0	0.593747	0.139630	0.811735	Uiso	? C
C21	1.0	0.604221	0.384216	0.505510	Uiso	? C
C22	1.0	0.611447	0.370878	0.765154	Uiso	? C
C23	1.0	0.621561	0.377485	0.005553	Uiso	? C
C24	1.0	0.614290	0.379278	0.257495	Uiso	? C
H1	1.0	0.358933	0.192738	0.905049	Uiso	? H
H2	1.0	0.382514	0.234520	0.528212	Uiso	? H
H3	1.0	0.374220	0.242957	0.353817	Uiso	? H
H4	1.0	0.397748	0.232788	0.990929	Uiso	? H
H5	1.0	0.296068	0.449073	0.813793	Uiso	? H
H6	1.0	0.291318	0.471964	0.961833	Uiso	? H
H7	1.0	0.396205	0.349552	0.364502	Uiso	? H
H8	1.0	0.415251	0.250156	0.808518	Uiso	? H
H9	1.0	0.336805	0.516669	0.806595	Uiso	? H
H10	1.0	0.452232	0.325528	0.259377	Uiso	? H
H11	1.0	0.517901	0.175855	0.168853	Uiso	? H
H12	1.0	0.517019	0.163743	0.685408	Uiso	? H
H13	1.0	0.530633	0.369976	0.666756	Uiso	? H
H14	1.0	0.529984	0.094978	0.483241	Uiso	? H
H15	1.0	0.540350	0.383219	0.132124	Uiso	? H
H16	1.0	0.535729	0.089813	0.241489	Uiso	? H
H17	1.0	0.541658	0.079020	0.746151	Uiso	? H
H18	1.0	0.540977	0.081103	0.000103	Uiso	? H
H19	1.0	0.544322	0.345470	0.930521	Uiso	? H
H20	1.0	0.579835	0.305638	0.195743	Uiso	? H
H21	1.0	0.579794	0.300682	0.693235	Uiso	? H
H22	1.0	0.589944	0.299967	0.456901	Uiso	? H
H23	1.0	0.612359	0.194774	0.262870	Uiso	? H
H24	1.0	0.611277	0.193308	0.008264	Uiso	? H
H25	1.0	0.611125	0.189480	0.766402	Uiso	? H
H26	1.0	0.612655	0.190316	0.521382	Uiso	? H
H27	1.0	0.629862	0.430599	0.964382	Uiso	? H
H28	1.0	0.614892	0.433632	0.216859	Uiso	? H
H29	1.0	0.595384	0.438306	0.459562	Uiso	? H
H30	1.0	0.430055	0.480919	0.820827	Uiso	? H
H31	1.0	0.629753	0.104662	0.572484	Uiso	? H
H32	1.0	0.628934	0.108574	0.336036	Uiso	? H
H33	1.0	0.632457	0.107869	0.083644	Uiso	? H
H34	1.0	0.633440	0.104329	0.836475	Uiso	? H
H35	1.0	0.656986	0.388290	0.730343	Uiso	? H
H36	1.0	0.666505	0.351270	0.020214	Uiso	? H
H37	1.0	0.653696	0.375315	0.503293	Uiso	? H
H38	1.0	0.661686	0.360019	0.268509	Uiso	? H
O1	1.0	0.431608	0.127269	0.499992	Uiso	? O
O2	1.0	0.439338	0.096310	0.001472	Uiso	? O
O3	1.0	0.364810	0.362020	0.026235	Uiso	? O
O4	1.0	0.486724	0.280394	0.581470	Uiso	? O
O5	1.0	0.505465	0.178235	0.920660	Uiso	? O

O6	1.0	0.508428	0.196344	0.410389	Uiso	? O
O7	1.0	0.517651	0.367137	0.384463	Uiso	? O
O8	1.0	0.429488	0.435603	0.891382	Uiso	? O

Cif files: Norrish II deacetylation mechanism with OH⁻ catalyst

Structure 1:

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O '
_cell_length_a              22.340446
_cell_length_b              22.000000
_cell_length_c              10.278996
_cell_angle_alpha           67.142311
_cell_angle_beta            84.730064
_cell_angle_gamma           84.778366
_cell_volume                 4627.186006
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.407702  0.244359  0.425971  Uiso  ? C
C2      1.0  0.402465  0.210923  0.909805  Uiso  ? C
C3      1.0  0.416886  0.427634  0.877908  Uiso  ? C
C4      1.0  0.433378  0.312534  0.369831  Uiso  ? C
C5      1.0  0.450744  0.183742  0.448501  Uiso  ? C
C6      1.0  0.450483  0.155456  0.948775  Uiso  ? C
C7      1.0  0.470068  0.379700  0.932936  Uiso  ? C
```

C8	1.0	0.481075	0.317776	0.460086	Uiso ? C
C9	1.0	0.555735	0.139343	0.194491	Uiso ? C
C10	1.0	0.554803	0.141226	0.443344	Uiso ? C
C11	1.0	0.557721	0.129937	0.702409	Uiso ? C
C12	1.0	0.558459	0.131089	0.951584	Uiso ? C
C13	1.0	0.578205	0.360410	0.654879	Uiso ? C
C14	1.0	0.579150	0.365514	0.899679	Uiso ? C
C15	1.0	0.582752	0.360985	0.151649	Uiso ? C
C16	1.0	0.583027	0.354380	0.406966	Uiso ? C
C17	1.0	0.591642	0.147475	0.306203	Uiso ? C
C18	1.0	0.592558	0.142409	0.559531	Uiso ? C
C19	1.0	0.593429	0.144040	0.058664	Uiso ? C
C20	1.0	0.594182	0.139799	0.811519	Uiso ? C
C21	1.0	0.605283	0.385377	0.502072	Uiso ? C
C22	1.0	0.611670	0.380969	0.753743	Uiso ? C
C23	1.0	0.614632	0.379992	0.004110	Uiso ? C
C24	1.0	0.614178	0.379144	0.257135	Uiso ? C
H1	1.0	0.359679	0.191825	0.903891	Uiso ? H
H2	1.0	0.382648	0.234091	0.528704	Uiso ? H
H3	1.0	0.374858	0.243365	0.353436	Uiso ? H
H4	1.0	0.397845	0.232051	0.991456	Uiso ? H
H5	1.0	0.390923	0.408134	0.818425	Uiso ? H
H6	1.0	0.387310	0.430085	0.967281	Uiso ? H
H7	1.0	0.396489	0.350012	0.365749	Uiso ? H
H8	1.0	0.416001	0.250062	0.809008	Uiso ? H
H9	1.0	0.430583	0.476995	0.809045	Uiso ? H
H10	1.0	0.452632	0.325511	0.261002	Uiso ? H
H11	1.0	0.518478	0.177531	0.166924	Uiso ? H
H12	1.0	0.517586	0.164212	0.684957	Uiso ? H
H13	1.0	0.530801	0.378936	0.654790	Uiso ? H
H14	1.0	0.529702	0.096106	0.482495	Uiso ? H
H15	1.0	0.537489	0.385704	0.140900	Uiso ? H
H16	1.0	0.534971	0.091310	0.240669	Uiso ? H
H17	1.0	0.541632	0.079581	0.745673	Uiso ? H
H18	1.0	0.540910	0.081482	0.999586	Uiso ? H
H19	1.0	0.566223	0.313893	0.946051	Uiso ? H
H20	1.0	0.575808	0.307594	0.196189	Uiso ? H
H21	1.0	0.577108	0.306214	0.697266	Uiso ? H
H22	1.0	0.589964	0.300202	0.457810	Uiso ? H
H23	1.0	0.612546	0.195512	0.262388	Uiso ? H
H24	1.0	0.611896	0.193293	0.007573	Uiso ? H
H25	1.0	0.611463	0.189731	0.766350	Uiso ? H
H26	1.0	0.613341	0.190433	0.521387	Uiso ? H
H27	1.0	0.623728	0.432874	0.959571	Uiso ? H
H28	1.0	0.616557	0.433248	0.217637	Uiso ? H
H29	1.0	0.598243	0.439587	0.451929	Uiso ? H
H30	1.0	0.618921	0.434308	0.705938	Uiso ? H
H31	1.0	0.630134	0.104780	0.572128	Uiso ? H
H32	1.0	0.629121	0.109348	0.335008	Uiso ? H
H33	1.0	0.632525	0.107902	0.084254	Uiso ? H
H34	1.0	0.633982	0.104619	0.836094	Uiso ? H
H35	1.0	0.656757	0.355190	0.769354	Uiso ? H
H36	1.0	0.658791	0.352413	0.010344	Uiso ? H
H37	1.0	0.654604	0.374789	0.502005	Uiso ? H
H38	1.0	0.661097	0.358171	0.266624	Uiso ? H
H39	1.0	0.523329	0.657551	0.723911	Uiso ? H
O1	1.0	0.432606	0.128003	0.497553	Uiso ? O
O2	1.0	0.440606	0.096616	0.001839	Uiso ? O
O3	1.0	0.465713	0.322820	0.018598	Uiso ? O
O4	1.0	0.486931	0.280892	0.583206	Uiso ? O
O5	1.0	0.506212	0.178852	0.919139	Uiso ? O
O6	1.0	0.509296	0.197474	0.410370	Uiso ? O
O7	1.0	0.517955	0.367405	0.385869	Uiso ? O
O8	1.0	0.522714	0.407458	0.874057	Uiso ? O
O9	1.0	0.567373	0.656121	0.725139	Uiso ? O

Structure 2:

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O'
_cell_length_a             22.340446
_cell_length_b             22.000000
_cell_length_c             10.278996
_cell_angle_alpha          67.142311
_cell_angle_beta           84.730064
_cell_angle_gamma          84.778366
_cell_volume               4627.186006
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.404329  0.230854  0.454267  Uiso  ? C
C2      1.0  0.400066  0.207447  0.911055  Uiso  ? C
C3      1.0  0.403461  0.431749  0.890049  Uiso  ? C
C4      1.0  0.429018  0.299329  0.381793  Uiso  ? C
C5      1.0  0.446972  0.170251  0.473261  Uiso  ? C
C6      1.0  0.446260  0.150130  0.957256  Uiso  ? C
C7      1.0  0.459322  0.386082  0.928627  Uiso  ? C
C8      1.0  0.479913  0.310285  0.456663  Uiso  ? C
C9      1.0  0.551944  0.128484  0.203209  Uiso  ? C
C10     1.0  0.551045  0.130866  0.451702  Uiso  ? C
C11     1.0  0.554712  0.119961  0.710447  Uiso  ? C
C12     1.0  0.554136  0.123925  0.956931  Uiso  ? C
C13     1.0  0.567576  0.371925  0.635393  Uiso  ? C
C14     1.0  0.569146  0.377196  0.880389  Uiso  ? C
C15     1.0  0.583720  0.360034  0.139151  Uiso  ? C
C16     1.0  0.574542  0.364773  0.386461  Uiso  ? C
C17     1.0  0.587432  0.138438  0.313377  Uiso  ? C
C18     1.0  0.588741  0.134159  0.566065  Uiso  ? C
C19     1.0  0.589196  0.135630  0.065506  Uiso  ? C
C20     1.0  0.590412  0.132249  0.817651  Uiso  ? C
C21     1.0  0.589785  0.401396  0.478320  Uiso  ? C
C22     1.0  0.598828  0.397266  0.730446  Uiso  ? C
C23     1.0  0.602987  0.388153  0.986212  Uiso  ? C
C24     1.0  0.601434  0.395057  0.232928  Uiso  ? C
H1      1.0  0.355000  0.188814  0.929578  Uiso  ? H
H2      1.0  0.384846  0.223257  0.561289  Uiso  ? H
H3      1.0  0.367026  0.226960  0.395608  Uiso  ? H
H4      1.0  0.403687  0.239042  0.970328  Uiso  ? H
H5      1.0  0.377860  0.416427  0.822718  Uiso  ? H
H6      1.0  0.375038  0.425961  0.986497  Uiso  ? H
H7      1.0  0.392510  0.337441  0.375875  Uiso  ? H
H8      1.0  0.409328  0.237940  0.798639  Uiso  ? H
H9      1.0  0.413975  0.483463  0.833252  Uiso  ? H
H10     1.0  0.444981  0.308531  0.271772  Uiso  ? H
H11     1.0  0.512975  0.164545  0.178314  Uiso  ? H
H12     1.0  0.513128  0.151968  0.695148  Uiso  ? H
H13     1.0  0.518650  0.382663  0.644425  Uiso  ? H
```

H14	1.0	0.527519	0.084623	0.492200	Uiso ? H
H15	1.0	0.534636	0.356146	0.150719	Uiso ? H
H16	1.0	0.533455	0.079220	0.249463	Uiso ? H
H17	1.0	0.540970	0.068624	0.754599	Uiso ? H
H18	1.0	0.535704	0.074699	0.004063	Uiso ? H
H19	1.0	0.555786	0.325500	0.921348	Uiso ? H
H20	1.0	0.601665	0.307490	0.185333	Uiso ? H
H21	1.0	0.573782	0.317686	0.675741	Uiso ? H
H22	1.0	0.590436	0.312377	0.436577	Uiso ? H
H23	1.0	0.606266	0.187645	0.268567	Uiso ? H
H24	1.0	0.606784	0.185411	0.016682	Uiso ? H
H25	1.0	0.606274	0.182830	0.770508	Uiso ? H
H26	1.0	0.606899	0.183602	0.527028	Uiso ? H
H27	1.0	0.579866	0.502040	0.901620	Uiso ? H
H28	1.0	0.586278	0.447765	0.186970	Uiso ? H
H29	1.0	0.573318	0.453631	0.429678	Uiso ? H
H30	1.0	0.600162	0.451559	0.683366	Uiso ? H
H31	1.0	0.627982	0.098622	0.576785	Uiso ? H
H32	1.0	0.626373	0.102133	0.340349	Uiso ? H
H33	1.0	0.628862	0.100200	0.088513	Uiso ? H
H34	1.0	0.631018	0.098272	0.842971	Uiso ? H
H35	1.0	0.646096	0.377440	0.739708	Uiso ? H
H36	1.0	0.646508	0.410323	0.951927	Uiso ? H
H37	1.0	0.639441	0.401530	0.470454	Uiso ? H
H38	1.0	0.650786	0.393019	0.235621	Uiso ? H
H39	1.0	0.544252	0.565961	0.813753	Uiso ? H
O1	1.0	0.430280	0.114204	0.532187	Uiso ? O
O2	1.0	0.435293	0.092032	0.016874	Uiso ? O
O3	1.0	0.458814	0.327741	0.008152	Uiso ? O
O4	1.0	0.493850	0.274679	0.575551	Uiso ? O
O5	1.0	0.502909	0.172544	0.923063	Uiso ? O
O6	1.0	0.504144	0.185384	0.419558	Uiso ? O
O7	1.0	0.509569	0.364872	0.371937	Uiso ? O
O8	1.0	0.509580	0.417727	0.863350	Uiso ? O
O9	1.0	0.580205	0.550332	0.866853	Uiso ? O

Structure 3:

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O'
_cell_length_a              22.340446
_cell_length_b              22.000000
_cell_length_c              10.278996
_cell_angle_alpha           67.142311
_cell_angle_beta            84.730064
_cell_angle_gamma           84.778366
_cell_volume                4627.186006
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_adp_type
  _atom_site_U_iso_or_equiv
```

_atom	site	type	symbol						
C1	1.0	0.409605	0.239242	0.454381	Uiso	?	C		
C2	1.0	0.404380	0.222839	0.902940	Uiso	?	C		
C3	1.0	0.336678	0.419555	0.888892	Uiso	?	C		
C4	1.0	0.438934	0.305089	0.380471	Uiso	?	C		
C5	1.0	0.447577	0.175428	0.474986	Uiso	?	C		
C6	1.0	0.445683	0.161408	0.952443	Uiso	?	C		
C7	1.0	0.399326	0.407785	0.939805	Uiso	?	C		
C8	1.0	0.492130	0.312498	0.453551	Uiso	?	C		
C9	1.0	0.549729	0.124158	0.211998	Uiso	?	C		
C10	1.0	0.548826	0.127256	0.459579	Uiso	?	C		
C11	1.0	0.551282	0.117213	0.718076	Uiso	?	C		
C12	1.0	0.551014	0.122226	0.963661	Uiso	?	C		
C13	1.0	0.584229	0.373294	0.632417	Uiso	?	C		
C14	1.0	0.578849	0.404650	0.852947	Uiso	?	C		
C15	1.0	0.594635	0.369401	0.122539	Uiso	?	C		
C16	1.0	0.588245	0.363871	0.382669	Uiso	?	C		
C17	1.0	0.585898	0.131854	0.323787	Uiso	?	C		
C18	1.0	0.586585	0.127918	0.576384	Uiso	?	C		
C19	1.0	0.587180	0.129662	0.075488	Uiso	?	C		
C20	1.0	0.587772	0.127156	0.826967	Uiso	?	C		
C21	1.0	0.604208	0.401010	0.473536	Uiso	?	C		
C22	1.0	0.615122	0.405636	0.716411	Uiso	?	C		
C23	1.0	0.618212	0.408316	0.968993	Uiso	?	C		
C24	1.0	0.615576	0.395395	0.229250	Uiso	?	C		
H1	1.0	0.357501	0.209306	0.924355	Uiso	?	H		
H2	1.0	0.391026	0.233432	0.561193	Uiso	?	H		
H3	1.0	0.370865	0.238478	0.396323	Uiso	?	H		
H4	1.0	0.412937	0.255723	0.956424	Uiso	?	H		
H5	1.0	0.326156	0.380177	0.855813	Uiso	?	H		
H6	1.0	0.304057	0.419980	0.975357	Uiso	?	H		
H7	1.0	0.405272	0.345924	0.373854	Uiso	?	H		
H8	1.0	0.414220	0.250087	0.789114	Uiso	?	H		
H9	1.0	0.332054	0.467752	0.801066	Uiso	?	H		
H10	1.0	0.453745	0.313348	0.270221	Uiso	?	H		
H11	1.0	0.512288	0.162177	0.186027	Uiso	?	H		
H12	1.0	0.511837	0.152468	0.698675	Uiso	?	H		
H13	1.0	0.535051	0.380897	0.645251	Uiso	?	H		
H14	1.0	0.522185	0.083215	0.499004	Uiso	?	H		
H15	1.0	0.545117	0.372711	0.128239	Uiso	?	H		
H16	1.0	0.528983	0.076094	0.257311	Uiso	?	H		
H17	1.0	0.534034	0.067360	0.762575	Uiso	?	H		
H18	1.0	0.527927	0.075671	0.008782	Uiso	?	H		
H19	1.0	0.552838	0.359859	0.900775	Uiso	?	H		
H20	1.0	0.608416	0.316400	0.153640	Uiso	?	H		
H21	1.0	0.593946	0.319409	0.678153	Uiso	?	H		
H22	1.0	0.603718	0.311335	0.432261	Uiso	?	H		
H23	1.0	0.607538	0.179476	0.279319	Uiso	?	H		
H24	1.0	0.608034	0.177720	0.029074	Uiso	?	H		
H25	1.0	0.606937	0.176116	0.779855	Uiso	?	H		
H26	1.0	0.608093	0.175527	0.537592	Uiso	?	H		
H27	1.0	0.617153	0.461471	0.948999	Uiso	?	H		
H28	1.0	0.604166	0.449066	0.190659	Uiso	?	H		
H29	1.0	0.586600	0.452821	0.424683	Uiso	?	H		
H30	1.0	0.621092	0.458171	0.650627	Uiso	?	H		
H31	1.0	0.623426	0.089302	0.591060	Uiso	?	H		
H32	1.0	0.622768	0.093024	0.353661	Uiso	?	H		
H33	1.0	0.624545	0.091302	0.099352	Uiso	?	H		
H34	1.0	0.626185	0.090197	0.855848	Uiso	?	H		
H35	1.0	0.660478	0.381908	0.741402	Uiso	?	H		
H36	1.0	0.665280	0.392120	0.951062	Uiso	?	H		
H37	1.0	0.653796	0.402381	0.461658	Uiso	?	H		
H38	1.0	0.665003	0.388982	0.233184	Uiso	?	H		
H39	1.0	0.499570	0.455528	0.870044	Uiso	?	H		
O1	1.0	0.426840	0.121225	0.534209	Uiso	?	O		
O2	1.0	0.428724	0.105049	0.008832	Uiso	?	O		
O3	1.0	0.424135	0.349930	0.991915	Uiso	?	O		
O4	1.0	0.506212	0.276043	0.572012	Uiso	?	O		
O5	1.0	0.504129	0.176449	0.925809	Uiso	?	O		
O6	1.0	0.505556	0.185260	0.423019	Uiso	?	O		

O7	1.0	0.523430	0.365240	0.367795	Uiso ? O
O8	1.0	0.428274	0.456689	0.932044	Uiso ? O
O9	1.0	0.538429	0.461842	0.810369	Uiso ? O

Structure 4:

```

=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C  H  O '
_cell_length_a             22.340446
_cell_length_b             22.000000
_cell_length_c             10.278996
_cell_angle_alpha          67.142311
_cell_angle_beta           84.730064
_cell_angle_gamma          84.778366
_cell_volume               4627.186006
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_adp_type
  _atom_site_U_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
  C1      1.0  0.407475  0.243948  0.426527  Uiso ? C
  C2      1.0  0.402308  0.211607  0.909764  Uiso ? C
  C3      1.0  0.215947  0.427608  0.877143  Uiso ? C
  C4      1.0  0.433258  0.312085  0.369800  Uiso ? C
  C5      1.0  0.450340  0.183159  0.449795  Uiso ? C
  C6      1.0  0.450078  0.155958  0.948482  Uiso ? C
  C7      1.0  0.271036  0.382982  0.927750  Uiso ? C
  C8      1.0  0.481403  0.316900  0.459395  Uiso ? C
  C9      1.0  0.555713  0.138208  0.195276  Uiso ? C
  C10     1.0  0.554412  0.140703  0.443466  Uiso ? C
  C11     1.0  0.557305  0.129350  0.702793  Uiso ? C
  C12     1.0  0.557982  0.130695  0.951862  Uiso ? C
  C13     1.0  0.577279  0.359974  0.653476  Uiso ? C
  C14     1.0  0.581027  0.355067  0.906895  Uiso ? C
  C15     1.0  0.582203  0.359397  0.152312  Uiso ? C
  C16     1.0  0.582600  0.355008  0.405542  Uiso ? C
  C17     1.0  0.591497  0.146640  0.306774  Uiso ? C
  C18     1.0  0.592064  0.142085  0.559717  Uiso ? C
  C19     1.0  0.593308  0.142858  0.059433  Uiso ? C
  C20     1.0  0.593719  0.139367  0.811786  Uiso ? C
  C21     1.0  0.604526  0.386206  0.500768  Uiso ? C
  C22     1.0  0.608913  0.380981  0.754062  Uiso ? C
  C23     1.0  0.612927  0.378981  0.003685  Uiso ? C
  C24     1.0  0.613246  0.379637  0.255216  Uiso ? C
  H1      1.0  0.359318  0.192676  0.904791  Uiso ? H
  H2      1.0  0.382770  0.234087  0.529530  Uiso ? H
  H3      1.0  0.374145  0.242897  0.355062  Uiso ? H
  H4      1.0  0.397195  0.233065  0.990850  Uiso ? H
  H5      1.0  0.190012  0.408050  0.817760  Uiso ? H
  H6      1.0  0.186938  0.429972  0.967549  Uiso ? H
  H7      1.0  0.396556  0.349663  0.366150  Uiso ? H
  H8      1.0  0.415579  0.250834  0.808904  Uiso ? H
  H9      1.0  0.229099  0.477392  0.808233  Uiso ? H

```

H10	1.0	0.452295	0.325634	0.260590	Uiso ? H
H11	1.0	0.518285	0.176193	0.167750	Uiso ? H
H12	1.0	0.517038	0.163401	0.685637	Uiso ? H
H13	1.0	0.529317	0.376205	0.654756	Uiso ? H
H14	1.0	0.529353	0.095536	0.482882	Uiso ? H
H15	1.0	0.536111	0.381921	0.142523	Uiso ? H
H16	1.0	0.534938	0.090186	0.241680	Uiso ? H
H17	1.0	0.541441	0.078892	0.746025	Uiso ? H
H18	1.0	0.540060	0.081250	0.999359	Uiso ? H
H19	1.0	0.585007	0.300546	0.949624	Uiso ? H
H20	1.0	0.577207	0.305584	0.198479	Uiso ? H
H21	1.0	0.577904	0.305672	0.694458	Uiso ? H
H22	1.0	0.590151	0.300897	0.456578	Uiso ? H
H23	1.0	0.612325	0.194722	0.262646	Uiso ? H
H24	1.0	0.612152	0.191926	0.008799	Uiso ? H
H25	1.0	0.610868	0.189358	0.766514	Uiso ? H
H26	1.0	0.612579	0.190255	0.521631	Uiso ? H
H27	1.0	0.614828	0.433305	0.953491	Uiso ? H
H28	1.0	0.614537	0.433927	0.214068	Uiso ? H
H29	1.0	0.596805	0.440393	0.451098	Uiso ? H
H30	1.0	0.609065	0.435454	0.714262	Uiso ? H
H31	1.0	0.629854	0.104686	0.572116	Uiso ? H
H32	1.0	0.629040	0.108605	0.335860	Uiso ? H
H33	1.0	0.632200	0.106443	0.084898	Uiso ? H
H34	1.0	0.633621	0.104302	0.836327	Uiso ? H
H35	1.0	0.656733	0.362802	0.757646	Uiso ? H
H36	1.0	0.660091	0.358711	0.008342	Uiso ? H
H37	1.0	0.653941	0.376308	0.500446	Uiso ? H
H38	1.0	0.660522	0.359789	0.263981	Uiso ? H
H39	1.0	0.508441	0.416992	0.874705	Uiso ? H
O1	1.0	0.432474	0.127364	0.501083	Uiso ? O
O2	1.0	0.440189	0.097130	0.000238	Uiso ? O
O3	1.0	0.268069	0.323979	0.017586	Uiso ? O
O4	1.0	0.488478	0.279007	0.581110	Uiso ? O
O5	1.0	0.506168	0.178930	0.920031	Uiso ? O
O6	1.0	0.508967	0.196870	0.409177	Uiso ? O
O7	1.0	0.517590	0.367470	0.385651	Uiso ? O
O8	1.0	0.323730	0.402015	0.882434	Uiso ? O
O9	1.0	0.516963	0.369253	0.913182	Uiso ? O