

**Indium Oxide Bulk:**

In O

```
1.0000000000000000
  10.3521190244000003  0.0000000000000000  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  10.3521190244000003  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  10.3521190244000003
```

32 48

Cartesian

```
0.0000000000000000  2.5880297561000001  4.8129736071776117
0.0000000000000000  7.7640895063987383  5.5391454172223886
5.1760595122000002  7.7640895063987383  9.9890331193776216
5.1760595122000002  2.5880297561000001  0.3630857290363620
0.0000000000000000  7.7640895063987383  0.3630857290363620
0.0000000000000000  2.5880297561000001  9.9890331193776216
5.1760595122000002  2.5880297561000001  5.5391454172223886
5.1760595122000002  7.7640895063987383  4.8129736071776117
4.8129736071776117 -0.0000000000000000  2.5880297561000001
5.5391454172223886 -0.0000000000000000  7.7640895063987383
9.9890331193776216  5.1760595122000002  7.7640895063987383
0.3630857290363620  5.1760595122000002  2.5880297561000001
0.3630857290363620  0.0000000000000000  7.7640895063987383
9.9890331193776216  0.0000000000000000  2.5880297561000001
5.5391454172223886  5.1760595122000002  2.5880297561000001
4.8129736071776117  5.1760595122000002  7.7640895063987383
2.5880297561000001  4.8129736071776117 -0.0000000000000000
7.7640895063987383  5.5391454172223886  0.0000000000000000
7.7640895063987383  9.9890331193776216  5.1760595122000002
2.5880297561000001  0.3630857290363620  5.1760595122000002
7.7640895063987383  0.3630857290363620  0.0000000000000000
2.5880297561000001  9.9890331193776216 -0.0000000000000000
2.5880297561000001  5.5391454172223886  5.1760595122000002
7.7640895063987383  4.8129736071776117  5.1760595122000002
2.5880297561000001  2.5880297561000001  2.5880297561000001
7.7640895063987383  7.7640895063987383  7.7640895063987383
2.5880297561000001  7.7640895063987383  7.7640895063987383
7.7640895063987383  2.5880297561000001  2.5880297561000001
7.7640895063987383  7.7640895063987383  2.5880297561000001
2.5880297561000001  2.5880297561000001  7.7640895063987383
7.7640895063987383  2.5880297561000001  7.7640895063987383
2.5880297561000001  7.7640895063987383  2.5880297561000001
1.1434526873133086  1.5995619297147763  6.3926390579706176
9.2086663370866884  8.7525568565864926  3.9594799664293823
4.0326068248866909  8.7525568565864926  1.2165789556998341
```

6.3195121995133094 1.5995619297147763 9.1355389920797858  
9.2086663370866884 6.7756216800135078 9.1355389920797858  
1.1434526873133086 3.5764975824852256 1.2165789556998341  
6.3195121995133094 3.5764975824852256 3.9594799664293823  
4.0326068248866909 6.7756216800135078 6.3926390579706176  
6.3926390579706176 1.1434526873133086 1.5995619297147763  
3.9594799664293823 9.2086663370866884 8.7525568565864926  
1.2165789556998341 4.0326068248866909 8.7525568565864926  
9.1355389920797858 6.3195121995133094 1.5995619297147763  
9.1355389920797858 9.2086663370866884 6.7756216800135078  
1.2165789556998341 1.1434526873133086 3.5764975824852256  
3.9594799664293823 6.3195121995133094 3.5764975824852256  
6.3926390579706176 4.0326068248866909 6.7756216800135078  
1.5995619297147763 6.3926390579706176 1.1434526873133086  
8.7525568565864926 3.9594799664293823 9.2086663370866884  
8.7525568565864926 1.2165789556998341 4.0326068248866909  
1.5995619297147763 9.1355389920797858 6.3195121995133094  
6.7756216800135078 9.1355389920797858 9.2086663370866884  
3.5764975824852256 1.2165789556998341 1.1434526873133086  
3.5764975824852256 3.9594799664293823 6.3195121995133094  
6.7756216800135078 6.3926390579706176 4.0326068248866909  
6.3195121995133094 6.7756216800135078 1.2165789556998341  
4.0326068248866909 3.5764975824852256 9.1355389920797858  
9.2086663370866884 3.5764975824852256 6.3926390579706176  
1.1434526873133086 6.7756216800135078 3.9594799664293823  
4.0326068248866909 1.5995619297147763 3.9594799664293823  
6.3195121995133094 8.7525568565864926 6.3926390579706176  
1.1434526873133086 8.7525568565864926 9.1355389920797858  
9.2086663370866884 1.5995619297147763 1.2165789556998341  
1.2165789556998341 6.3195121995133094 6.7756216800135078  
9.1355389920797858 4.0326068248866909 3.5764975824852256  
6.3926390579706176 9.2086663370866884 3.5764975824852256  
3.9594799664293823 1.1434526873133086 6.7756216800135078  
3.9594799664293823 4.0326068248866909 1.5995619297147763  
6.3926390579706176 6.3195121995133094 8.7525568565864926  
9.1355389920797858 1.1434526873133086 8.7525568565864926  
1.2165789556998341 9.2086663370866884 1.5995619297147763  
6.7756216800135078 1.2165789556998341 6.3195121995133094  
3.5764975824852256 9.1355389920797858 4.0326068248866909  
3.5764975824852256 6.3926390579706176 9.2086663370866884  
6.7756216800135078 3.9594799664293823 1.1434526873133086  
1.5995619297147763 3.9594799664293823 4.0326068248866909  
8.7525568565864926 6.3926390579706176 6.3195121995133094  
8.7525568565864926 9.1355389920797858 1.1434526873133086

1.5995619297147763 1.2165789556998341 9.2086663370866884

**Indium Oxide 111 slab 4 -layer:**

In O

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O

64 96

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.4268150447265550	0.6796171625805012	0.5835366971117106	T	T	T
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.9051329033591599	0.6551433153738012	0.5921000788599533	T	T	T
0.4016988346371438	0.1552809583329154	0.5919671727589603	T	T	T
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.9305254121420153	0.1773305328373780	0.5839064934888963	T	T	T
0.8935677926929437	0.4268150447265550	0.5835366971117106	T	T	T
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.4397237812670457	0.9051329033591599	0.5921000788599533	T	T	T
0.4430202070299337	0.4016988346371438	0.5919671727589603	T	T	T
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F

0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.8921440550206067	0.9305254121420153	0.5839064934888963	T	T	T
0.6796171625804941	0.8935677926929508	0.5835366971117106	T	T	T
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.6551433153738012	0.4397237812670457	0.5921000788599533	T	T	T
0.1552809583329154	0.4430202070299337	0.5919671727589602	T	T	T
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.1773305328373780	0.8921440550206067	0.5839064934888963	T	T	T
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.5874002739243488	T	T	T
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.6682830714125604	0.1638299843341663	0.5877949348437804	T	T	T
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.1638299843341663	0.1678869442532665	0.5877949348437804	T	T	T
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.1678869442532665	0.6682830714125604	0.5877949348437804	T	T	T
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.2349896324518080	0.9839307463242583	0.6478901818116444	T	T	T
0.7623065310190611	0.0125393587037267	0.6447609340912068	T	T	T
0.2664557440181413	0.5140248921940725	0.6404375517784103	T	T	T
0.7409772500769854	0.4896920356731707	0.6501789991012519	T	T	T
0.7810796212239336	0.2349896324518080	0.6478901818116444	T	T	T
0.2251541102772193	0.7623065310190611	0.6447609340912068	T	T	T
0.2195193637877866	0.2664557440181413	0.6404375517784103	T	T	T
0.7693307142498438	0.7409772500769854	0.6501789991012519	T	T	T
0.9839307463242583	0.7810796212239336	0.6478901818116444	T	T	T
0.0125393587037267	0.2251541102772193	0.6447609340912068	T	T	T
0.5140248921940725	0.2195193637877866	0.6404375517784103	T	T	T
0.4896920356731707	0.7693307142498438	0.6501789991012519	T	T	T
-0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.6506021300924835	T	T	T
-0.0086779028806744	0.4963367550934825	0.6452443846288979	T	T	T
0.4963367550934754	0.5123411477871991	0.6452443846288979	T	T	T
0.5123411477871920	-0.0086779028806744	0.6452443846288979	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F

0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.4822796708811169	0.5258978442065194	0.6026768054048346	T	T	T
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.0623485483575514	0.6057228516802907	0.5762086117887227	T	T	T
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.5858385298172286	0.8218081093243726	0.5669271082789217	T	T	T
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.8353469811184280	0.1020209042567941	0.5773767680691313	T	T	T
0.9918224849123566	0.4822796708811169	0.6026768054048346	T	T	T
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.3319285999621582	0.0623485483575514	0.5762086117887227	T	T	T
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.5923533608583988	0.5858385298172286	0.5669271082789217	T	T	T
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.0626321146247776	0.8353469811184280	0.5773767680691313	T	T	T
0.5258978442065194	0.9918224849123566	0.6026768054048346	T	T	T
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.6057228516802907	0.3319285999621582	0.5762086117887227	T	T	T
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8218081093243726	0.5923533608583988	0.5669271082789217	T	T	T
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1020209042567941	0.0626321146247777	0.5773767680691313	T	T	T
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.8510518588214316	0.8053213858262286	0.5722788949586387	T	T	T
0.2733438313663233	0.7267838814874855	0.6001750856460607	T	T	T
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.7476705288745908	0.5125213443154241	0.6081495171423553	T	T	T
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F

0.4945464048176215	0.2316890922693524	0.5978314766997694	T	T	T
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.3436267553523471	0.8510518588214316	0.5722788949586387	T	T	T
-0.0001277128538083	0.2733438313663233	0.6001750856460607	T	T	T
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.7398081268099846	0.7476705288745908	0.6081495171423553	T	T	T
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.2737645029130259	0.4945464048176215	0.5978314766997694	T	T	T
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.8053213858262286	0.3436267553523471	0.5722788949586387	T	T	T
0.7267838814874855	-0.0001277128538083	0.6001750856460607	T	T	T
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.5125213443154241	0.7398081268099846	0.6081495171423553	T	T	T
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.2316890922693524	0.2737645029130259	0.5978314766997694	T	T	T
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.1856342811281044	0.1397128217143142	0.6303560185597482	T	T	T
0.5988040741541907	0.0651260422406952	0.6576098686347956	T	T	T
0.0762607439934630	0.8388346388277157	0.6672244267330413	T	T	T
0.8266963149495365	0.5733092263942499	0.6585376016591145	T	T	T
0.6746528971575885	0.1856342811281044	0.6303560185597482	T	T	T
0.3360698836051070	0.5988040741541907	0.6576098686347956	T	T	T
0.0849046171788217	0.0762607439934630	0.6672244267330413	T	T	T
0.5999944586562138	0.8266963149495365	0.6585376016591145	T	T	T
0.1397128217143142	0.6746528971575885	0.6303560185597482	T	T	T
0.0651260422406881	0.3360698836051070	0.6576098686347956	T	T	T
0.8388346388277157	0.0849046171788217	0.6672244267330413	T	T	T
0.5733092263942499	0.5999944586562138	0.6585376016591145	T	T	T
0.8189953001512021	0.8522854490776554	0.6604963597084140	T	T	T
0.3974934606454716	0.9421085130843887	0.6354989374091856	T	T	T
0.9263386281533025	0.1507154535200085	0.6254122676126569	T	T	T
0.1717444501059262	0.4387933426907797	0.6391355415777904	T	T	T
0.3287192507711429	0.8189953001512021	0.6604963597084140	T	T	T
0.6603980262701393	0.3974934606454716	0.6354989374091856	T	T	T
0.9229459183266888	0.9263386281533025	0.6254122676126569	T	T	T
0.3894622072032801	0.1717444501059262	0.6391355415777904	T	T	T
0.8522854490776554	0.3287192507711429	0.6604963597084140	T	T	T
0.9421085130843887	0.6603980262701393	0.6354989374091856	T	T	T
0.1507154535200085	0.9229459183266888	0.6254122676126569	T	T	T
0.4387933426907797	0.3894622072032872	0.6391355415777904	T	T	T

## 5% Indium Tin Oxide 111 slab 4-layer

In Sn O

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 37.7150080587397056

In Sn O

56 8 96

Selective dynamics

Direct

0.7653315393385192	0.0161374852239366	0.6435081645933587	T	T	T
0.2403401920921995	0.9843309352583415	0.6485502793054618	T	T	T
0.7747591045208870	0.2394204691404966	0.6483800686841628	T	T	T
0.0171201704266381	0.2164916234212317	0.6433793127037039	T	T	T
0.9850924025978226	0.7736755874335244	0.6485019319468649	T	T	T
0.0059649484673707	0.5049138758435223	0.6455144164011782	T	T	T
0.4878524429489097	0.0043774070039939	0.6455591445466102	T	T	T
0.5711050139140639	0.3215061998213713	0.7302137251482463	F	F	F
0.0957725477933451	0.3440739638851937	0.7190771920085552	F	F	F
0.9063886786343218	0.6527767010205139	0.8087135375255059	F	F	F
0.5954026351313857	0.8431342143429106	0.7184445361110789	F	F	F
0.0723481839551638	0.8196467319278042	0.7300196610483383	F	F	F
0.9307885756694603	0.1763992913457599	0.7979755869617478	F	F	F
0.8957164371836583	0.4244187868377196	0.7978589715806379	F	F	F
0.1070672751660240	0.5702693439724342	0.7302137251482463	F	F	F
0.5592186766464877	0.0954719189441917	0.7190771920085552	F	F	F
0.4400795796531582	0.9055157389199593	0.8087018218643678	F	F	F
0.4416205155501487	0.4017627172354779	0.8098454499965086	F	F	F
0.5598634887194152	0.5938629574054701	0.7184445361110789	F	F	F
0.1070866522751501	0.0714678941073643	0.7300196610483383	F	F	F
0.8921137522369804	0.9302254526599611	0.7977890805655434	F	F	F
0.6789953658111472	0.8946176390393035	0.7977501799599764	F	F	F
0.3217673805293373	0.1064662464661481	0.7302137251482463	F	F	F
0.3449483355957312	0.5586839063775031	0.7190771920085552	F	F	F
0.6535509999154172	0.4395120772944878	0.8090326026824641	F	F	F
0.1560773866552765	0.4410035156481129	0.8097736832860036	F	F	F
0.8446059148989562	0.5586868263331084	0.7184445361110789	F	F	F
0.8205048314696768	0.1071269550956586	0.7300196610483383	F	F	F
0.1769989722453147	0.8914156086320162	0.7979051351046920	F	F	F
0.6666879492714344	0.6655510953732744	0.8027695034783591	F	F	F
0.6677406932983487	0.1646548766865124	0.8038889513285525	F	F	F
0.3340699873820370	0.8315250108956107	0.7242646141760360	F	F	F
0.1650179846807021	0.1665283836205376	0.8039035909519328	F	F	F

0.1672973359396082	0.6670293019227671	0.8039110316670772	F	F	F
0.8324703755049825	0.3328596096534895	0.7242646141760360	F	F	F
0.2354151869841314	0.9820587859613802	0.8846629452281909	T	T	T
0.7602392280048886	0.0142675101831448	0.8799541737624128	T	T	T
0.2646013125004824	0.5126850794368677	0.8764483339716923	T	T	T
0.7824206718794492	0.2341398595042763	0.8847721756917720	T	T	T
0.2250314508100036	0.7596579617670139	0.8800926120617925	T	T	T
0.2221683601391214	0.2639664703770070	0.8764307604917408	T	T	T
0.9827738890147392	0.7816125833561294	0.8844481889395933	T	T	T
0.0152325642487348	0.2240254805812761	0.8802134584741222	T	T	T
0.5134031573945940	0.2213756366701980	0.8763967861134278	T	T	T
0.9944033051766159	0.4922216382898523	0.8821265844192940	T	T	T
0.4929364480930268	0.5117416046937782	0.8823991619214873	T	T	T
0.5128929029482551	0.9935535609248424	0.8820475037160356	T	T	T
0.4254409681199718	0.6780430216207378	0.7978661016285145	F	F	F
0.4023745987230143	0.1552419140575196	0.8098017441906222	F	F	F
0.3333132055655028	0.3327453316617905	0.7248359247731742	F	F	F
0.8333317331272525	0.8313056494183115	0.7242646141760360	F	F	F
0.2174243847551536	0.7646500650966861	0.6432793693824660	T	T	T
0.5063361909065499	0.4870969738757819	0.6454965612372460	T	T	T
0.7777145965370029	0.7344134472386821	0.6515922884775746	T	T	T
0.4866892248891798	0.7761214374806130	0.6515797921027734	T	T	T
0.7359519376109629	0.4854081679863150	0.6515889724772299	T	T	T
0.2291231760984363	0.2592188930496532	0.6411980834242414	T	T	T
0.5105216996284582	0.2280494353173011	0.6411855558830556	T	T	T
0.2604703050935741	0.5095640880321582	0.6410952523889828	T	T	T
0.7714781522659856	0.7378721416653589	0.8867463062810221	T	T	T
0.4902169136882806	0.7705248237863633	0.8868745898820635	T	T	T
0.0000040251861968	0.9991181366149833	0.6420511310943048	T	T	T
0.7385429705299401	0.4890748180454206	0.8870887213449803	T	T	T
0.0001892743749116	0.9993702559079611	0.8862962243919018	T	T	T
0.8128847962788078	0.8623871553854705	0.6660916706384856	T	T	T
0.3990512707572731	0.9317657244836631	0.6289684180217697	T	T	T
0.9282916445230562	0.1490541981825285	0.6187342002380282	T	T	T
0.1796323144001070	0.4226948498019233	0.6304798282012730	T	T	T
0.3233851064699112	0.8121779568920053	0.6661885402088049	T	T	T
0.6674831677535488	0.3980316275751890	0.6289231985707480	T	T	T
0.9216186749703197	0.9273033286670720	0.6188288648992356	T	T	T
0.3958952862158323	0.1785625004846714	0.6305615976551892	T	T	T
0.8635393189603404	0.3226464750542523	0.6661357343796657	T	T	T
0.9338828394806475	0.6660565884020674	0.6291199102822672	T	T	T
0.1500673873717229	0.9214182814847695	0.6187800044203497	T	T	T
0.4248002139550602	0.3949404428501539	0.6307984353728744	T	T	T
0.1851410116652786	0.1471952838307549	0.6288519553258761	T	T	T



0.5985923820175438	0.0629962033908020	0.6592480720882988	T	T	T
0.0701285124192063	0.8539389611865432	0.6734196984541740	T	T	T
0.8309607069820527	0.5602735940995383	0.6551176812614765	T	T	T
0.6667513679057433	0.1842750892352034	0.6292168014596106	T	T	T
0.3372585362946483	0.5981708014096350	0.6593061027171381	T	T	T
0.0750908358762660	0.0692884910557661	0.6735443276309638	T	T	T
0.6075061083509276	0.8295370922075520	0.6552706791880827	T	T	T
0.1480854215327072	0.6658847119956143	0.6289643317707602	T	T	T
0.0639621991424914	0.3357390019327742	0.6593477087983149	T	T	T
0.8546682809124013	0.0747151880287007	0.6735674252126823	T	T	T
0.5621849925066386	0.6062786247852121	0.6551111782669757	T	T	T
0.4819466330681834	0.5258923831431588	0.8246539618970203	F	F	F
0.5157056528974664	0.4723168025344222	0.7031710746865940	F	F	F
0.9382179561018660	0.3938357985626055	0.7407554663269664	F	F	F
0.0626635892524305	0.6044972003998410	0.7880921849138502	F	F	F
0.4134789539146055	0.1791020841611726	0.7528988135720383	F	F	F
0.5867683956551488	0.8199001546195532	0.7761986296599588	F	F	F
0.1652751896643423	0.8971290675402415	0.7385849480023765	F	F	F
0.8355470658760069	0.1014914638698485	0.7896423023894599	F	F	F
0.9918482007875795	0.4808909551417528	0.8242731809394570	F	F	F
0.0115883806741621	0.5147326163742747	0.7031710746865940	F	F	F
0.6667554280548842	0.9368543259418871	0.7407554663269664	F	F	F
0.3321889488676817	0.0621498119028630	0.7880915589891870	F	F	F
0.4068903253506875	0.4130228565151839	0.7528988135720383	F	F	F
0.5913169259500748	0.5860550475720174	0.7762899239279122	F	F	F
0.9354551584237285	0.1641872661653920	0.7385849480023765	F	F	F
0.0624652659053098	0.8347245993904693	0.7897236804358769	F	F	F
0.5264850111917951	0.9904850173670567	0.8241636376548414	F	F	F
0.4726453699615192	0.0111632294020509	0.7031710746865940	F	F	F
0.3948988741132311	0.6650179164863772	0.7407554663269664	F	F	F
0.6050569934089580	0.3321030558730556	0.7881165400771053	F	F	F
0.1795706135457422	0.4061412956967914	0.7528988135720383	F	F	F
0.8215334534485592	0.5903462489193885	0.7762964213878263	F	F	F
0.8991418888258949	0.9343893682713826	0.7385849480023765	F	F	F
0.1019917850961249	0.0616889276128205	0.7895442927352150	F	F	F
0.1502554041553523	0.1930157623298641	0.7457436406118987	F	F	F
0.8500673711342230	0.8049940460776810	0.7832733882719722	F	F	F
0.2713471834514181	0.7279110869065732	0.8209633488884336	F	F	F
0.7266437877272409	0.2720664091381622	0.7077767387407548	F	F	F
0.7472787429720782	0.5115921562756824	0.8329885387473510	F	F	F
0.2526127549163633	0.4863993494907461	0.6961638816933373	F	F	F
0.4963822619574572	0.2308313654643754	0.8182001464552116	F	F	F
0.5025216625734217	0.7656930053037172	0.7101169368244840	F	F	F
0.6558603363579962	0.1500934214450282	0.7457436406118987	F	F	F

0.3441046919316975	0.8491841755207261	0.7831965268357379	F	F	F
0.0002185342478072	0.2703900300959958	0.8210447521411126	F	F	F
0.0011556798742944	0.7256778258794370	0.7077767387407548	F	F	F
0.7402239372597350	0.7464657997911175	0.8327092288363005	F	F	F
0.2602591083369674	0.2519335125370645	0.6961638816933373	F	F	F
0.2722069786744044	0.4954884255899330	0.8182498632974529	F	F	F
0.7300562656035439	0.5011895953132282	0.7101169368244840	F	F	F
0.1938240818969916	0.6551493419751111	0.7457436406118987	F	F	F
0.8058246900536616	0.3434505237801631	0.7833462091970986	F	F	F
0.7284326216060037	0.9996919605955696	0.8207716627628443	F	F	F
0.2721399812473635	0.0004733764911151	0.7077767387407548	F	F	F
0.5123386499472105	0.7397396689742308	0.8327598506931437	F	F	F
0.4870674713351235	0.2598722351273111	0.6961638816933373	F	F	F
0.2316693074392120	0.2716058580258718	0.8182351008347979	F	F	F
0.7672940286364280	0.7287924234005558	0.7101169368244840	F	F	F
0.1873958362810741	0.1356743298040105	0.8620500981562941	T	T	T
0.6012281135452135	0.0657809860559489	0.8990698933654930	T	T	T
0.0718035612835957	0.8490579289678528	0.9094816285992341	T	T	T
0.8203604420644123	0.5748134726002356	0.8976992094201147	T	T	T
0.6767318749883519	0.1861769803867909	0.8620493600222373	T	T	T
0.3322792966059434	0.6006152405391371	0.8990421727455046	T	T	T
0.0788960089916064	0.0707791786820711	0.9096412037406413	T	T	T
0.6047827167982147	0.8199151705308267	0.8976716447555332	T	T	T
0.1366561308522409	0.6755951149171446	0.8620698984688029	T	T	T
0.0666066421268916	0.3317961647195632	0.8991645875068864	T	T	T
0.8499963499105688	0.0779013023419776	0.9096423058829799	T	T	T
0.5749989843714510	0.6035762908864201	0.8978937753158578	T	T	T
0.8146412415360251	0.8505633485368123	0.8989736255947628	T	T	T
0.4021642597704417	0.9357113220195726	0.8689635981649924	T	T	T
0.9302995269549803	0.1445278868131138	0.8548824026516594	T	T	T
0.1697984112079763	0.4376400587008143	0.8736390404788811	T	T	T
0.3342263216045910	0.8141987866507939	0.8993199339253107	T	T	T
0.6611660626527941	0.4007124140975537	0.8693449825611932	T	T	T
0.9248910168943832	0.9296460095912181	0.8547434652653941	T	T	T
0.3920356453662486	0.1689230994973604	0.8735153215215555	T	T	T
0.8513627886189123	0.3331779345956730	0.8992143993282868	T	T	T
0.9368035544750649	0.6606653269783971	0.8689224150718509	T	T	T
0.1451601905811134	0.9246305207114062	0.8547648584532440	T	T	T
0.4382628588455703	0.3911716412117678	0.8734533488928589	T	T	T

**1H<sub>2</sub>O+Indium Tin Oxide 111 surface:**

In Sn O H

1.0000000000000000

14.6581649780000003 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189798837000000 12.7095312472999993 0.0000000000000000

-0.1539904818000000 0.0117322471000000 44.4205346059000021

In Sn O H

56 8 97 2

Selective dynamics

Direct

0.7601300110000011	0.0111199609999986	0.3212997449999975	F	F	F
0.2434165649999969	0.9854015660000002	0.3303952670000001	F	F	F
0.7751763210000036	0.2373103790000002	0.3303952670000001	F	F	F
0.7758184010000022	0.7360378240000003	0.3303952670000001	F	F	F
0.0149432030000014	0.2262095230000014	0.3212997449999975	F	F	F
0.9921246899999971	0.7693967209999997	0.3303952670000001	F	F	F
0.4928005430000013	0.7693967209999997	0.3303952670000001	F	F	F
0.0028580700000020	0.4978031030000025	0.3258475270000005	F	F	F
0.5041760359999969	0.9965305489999992	0.3258475270000005	F	F	F
0.5754696389999978	0.3201690450000001	0.3988024339999967	F	F	F
0.1000335600000000	0.3427603160000032	0.3893470450000009	F	F	F
0.5996578370000023	0.8418218679999967	0.3888098850000006	F	F	F
0.0767109720000008	0.8183099729999981	0.3986376789999966	F	F	F
0.1114318609999998	0.5689321970000023	0.3988024339999967	F	F	F
0.5634797049999989	0.0941582849999989	0.3893470450000009	F	F	F
0.5641186730000030	0.5925506089999999	0.3888098850000006	F	F	F
0.1114494420000014	0.0701311669999996	0.3986376789999966	F	F	F
0.3261319590000014	0.1051290999999992	0.3988024339999967	F	F	F
0.3492093770000011	0.5573703139999964	0.3893470450000009	F	F	F
0.8488609910000022	0.5573744860000005	0.3888098850000006	F	F	F
0.8248676340000003	0.1057902270000000	0.3986376789999966	F	F	F
0.3383793029999964	0.8302004350000018	0.3937513699999968	F	F	F
0.8367797049999979	0.3315350439999989	0.3937513699999968	F	F	F
0.7420985669999993	0.4866741200000035	0.3303952670000001	F	F	F
0.3376278109999973	0.3314195660000010	0.3942364460000007	F	F	F
0.8376410449999980	0.8299810290000025	0.3937513699999968	F	F	F
0.7615584035293913	0.0087520487172602	0.5238950073362538	T	T	T
0.9125551308566511	0.6504713154809930	0.4656770032778365	T	T	T
0.4310506726422199	0.6748287436429844	0.4569246488020938	T	T	T
0.9335401169167987	0.1753552645178284	0.4572446287585232	T	T	T
0.4084592762247033	0.1532063153910794	0.4664668928494798	T	T	T
0.2356528478893930	0.7537109614546720	0.5263131252312182	T	T	T
0.4451023752214313	0.9036555771349299	0.4658479630353575	T	T	T

0.9012292484034052	0.4230546880295980	0.4560805874424709	T	T	T
0.7690310266410576	0.2492143701121721	0.5334504959741491	T	T	T
0.8974683713136010	0.9283474884386469	0.4559078162916792	T	T	T
0.4468885330300804	0.4008560913640376	0.4664088080798154	T	T	T
0.2277409334804635	0.2616931920818172	0.5228895461297750	T	T	T
0.0162916430349330	0.2248816599257113	0.5266235743518269	T	T	T
0.6574488991130228	0.4400615008990582	0.4637096619028689	T	T	T
0.6842645990130408	0.8918331669538594	0.4559056655880352	T	T	T
0.1831378703254637	0.8894154658110910	0.4560576541228744	T	T	T
0.1619337786165731	0.4386636287558466	0.4663757621141122	T	T	T
0.5213436688908557	0.2187599986550235	0.5231942044443656	T	T	T
0.6725572004432990	0.6652905069836750	0.4603305055794089	T	T	T
0.0011880989936390	0.4903215962994137	0.5278994353901906	T	T	T
0.6730626919933196	0.1635890682613983	0.4612216385333128	T	T	T
0.5121410086544086	0.4898645475511619	0.5307423437149390	T	T	T
0.1695806316188887	0.1648295534763178	0.4615616459084023	T	T	T
0.5171631218563859	0.9912670277159779	0.5277650661092768	T	T	T
0.1728815465269009	0.6650605773716669	0.4613334509138632	T	T	T
0.2423422881482818	0.9807544791897264	0.5301193208224891	T	T	T
0.2719403600556778	0.5104629508865992	0.5226598966494492	T	T	T
0.9895456435290717	0.7808717103892403	0.5296185702720881	T	T	T
0.2318915720000021	0.7582958650000009	0.3212997449999975	F	F	F
0.5035339559999983	0.4978031030000025	0.3258475270000005	F	F	F
0.2312494130000005	0.2595683819999977	0.3212997449999975	F	F	F
0.5142674240000034	0.2262095040000034	0.3212997449999975	F	F	F
0.2649692749999986	0.5089321609999971	0.3212997449999975	F	F	F
0.0035676700000025	0.9990756250000032	0.3258475270000005	F	F	F
0.7454414853853286	0.4885376933057337	0.5301719182813054	T	T	T
0.7774940336704730	0.7357449321731063	0.5319021965502452	T	T	T
0.4977334144388732	0.7648315376253200	0.5324517237930971	T	T	T
0.0107489999033116	0.9971891325980335	0.5294931097048081	T	T	T
0.8197246590000020	0.8569508429999999	0.3438201640000003	F	F	F
0.3987081670000023	0.9354814869999970	0.3117293459999999	F	F	F
0.9209922539999980	0.1532890789999968	0.3018949180000021	F	F	F
0.1730363100000005	0.4314418040000021	0.3139001839999978	F	F	F
0.3283148679999996	0.8129202289999995	0.3438201640000003	F	F	F
0.6696297120000025	0.3927234279999965	0.3117293459999999	F	F	F
0.9299447499999971	0.9155171419999988	0.3018949180000021	F	F	F
0.4004008089999971	0.1679411770000030	0.3139001839999978	F	F	F
0.8631193249999995	0.3221544190000003	0.3438201640000003	F	F	F
0.9417661310000014	0.6640191489999978	0.3117293459999999	F	F	F
0.1588438120000006	0.9234787780000033	0.3018949180000021	F	F	F
0.4368057220000026	0.3953728259999991	0.3139001839999978	F	F	F
0.1873433459999987	0.1386553729999989	0.3078748470000008	F	F	F

0.6083596860000000	0.0601247049999998	0.3399656449999995	F	F	F
0.0860756719999998	0.8423171000000025	0.3498000940000026	F	F	F
0.8340316199999975	0.5641643649999963	0.3377948270000033	F	F	F
0.6787528939999987	0.1826860150000016	0.3078748470000008	F	F	F
0.3374381340000028	0.6028827789999980	0.3399656449999995	F	F	F
0.0771230949999975	0.0800890829999972	0.3498000940000026	F	F	F
0.6066670510000023	0.8276650669999981	0.3377948270000033	F	F	F
0.1439485069999975	0.6734517499999981	0.3078748470000008	F	F	F
0.0653017340000019	0.3315870200000006	0.3399656449999995	F	F	F
0.8482241079999966	0.0721274100000002	0.3498000940000026	F	F	F
0.5702620779999990	0.6002333420000028	0.3377948270000033	F	F	F
0.5198188029999997	0.4710367289999979	0.3758420030000025	F	F	F
0.9426806099999965	0.3924763870000021	0.4077528669999992	F	F	F
0.4180544709999978	0.1777170419999976	0.4180630740000026	F	F	F
0.1697175740000034	0.8957742600000032	0.4059099489999980	F	F	F
0.0157015099999995	0.5134525650000015	0.3758420030000025	F	F	F
0.6712180939999968	0.9354948960000016	0.4077528669999992	F	F	F
0.4114658740000010	0.4116378180000027	0.4180630740000026	F	F	F
0.9398975889999974	0.1628324400000025	0.4059099489999980	F	F	F
0.4767584659999997	0.0098831760000024	0.3758420030000025	F	F	F
0.3993614999999977	0.6636584279999980	0.4077528669999992	F	F	F
0.1841461659999979	0.4047562530000022	0.4180630740000026	F	F	F
0.9035842740000035	0.9330345110000025	0.4059099489999980	F	F	F
0.1547643999999977	0.1916458330000026	0.4119880140000021	F	F	F
0.7307997249999971	0.2707766190000029	0.3797524499999980	F	F	F
0.2566607179999991	0.4851340860000022	0.3698926240000020	F	F	F
0.5066994279999975	0.7643982149999999	0.3817393400000029	F	F	F
0.6603693220000011	0.1487234940000022	0.4119880140000021	F	F	F
0.0053115979999987	0.7243880719999964	0.3797524499999980	F	F	F
0.2643070809999983	0.2506682470000001	0.3698926240000020	F	F	F
0.7342340009999972	0.4998948420000033	0.3817393400000029	F	F	F
0.1983331229999976	0.6537793850000000	0.4119880140000021	F	F	F
0.2762958710000021	0.9991835909999978	0.3797524499999980	F	F	F
0.4911154050000022	0.2586069589999980	0.3698926240000020	F	F	F
0.7714716719999970	0.7274976870000032	0.3817393400000029	F	F	F
0.8221623456045107	0.8494157790190392	0.5420822500024455	T	T	T
0.8556192786036849	0.8029434809178353	0.4439430946512725	T	T	T
0.2761593343827474	0.7268414290725083	0.4759496274398830	T	T	T
0.4072146367637623	0.9336250430016677	0.5168000884088012	T	T	T
0.7560030383754824	0.5132832356862187	0.4850025076486231	T	T	T
0.9247519631730121	0.1477543511121162	0.5073569188601482	T	T	T
0.5035608853884845	0.2276219916493723	0.4736418251597483	T	T	T
0.1762921626057098	0.4357822791619669	0.5207300257981592	T	T	T
0.3392357354158048	0.8125216235262860	0.5428079706434810	T	T	T

0.3498324291697921	0.8468842164631080	0.4439362054452635	T	T	T
0.0035243467528368	0.2684127447734563	0.4764470390898000	T	T	T
0.6746735493428883	0.4013295571364937	0.5111158042947721	T	T	T
0.7474387952638043	0.7445515490501819	0.4859594000927039	T	T	T
0.9266374638811388	0.9346165443482369	0.5051220916877253	T	T	T
0.2766700660718791	0.4943856250829641	0.4733283938450172	T	T	T
0.3981318043686891	0.1664281530793776	0.5203845969634159	T	T	T
0.8532859356150537	0.3362553328108892	0.5440279280925249	T	T	T
0.8111234915928358	0.3413535113269450	0.4436253524670159	T	T	T
0.7337815804874541	0.9973540341155893	0.4746770770804905	T	T	T
0.9432199847386211	0.6591707489648064	0.5172372954797161	T	T	T
0.5188159844456117	0.7375125266298799	0.4862731024639698	T	T	T
0.1527159979619030	0.9226450858785825	0.5042597516147634	T	T	T
0.2373831712739148	0.2692312923134597	0.4736130521045064	T	T	T
0.4425437595984124	0.3863718366150494	0.5186508783017063	T	T	T
0.4873704326745474	0.5232296921560432	0.4797479524202405	T	T	T
0.1900044978031382	0.1353471680496554	0.5110250298514251	T	T	T
0.6065583230792474	0.0628904924892250	0.5423905497155733	T	T	T
0.0680334700346623	0.6023496784472316	0.4480359823727653	T	T	T
0.0767221765306999	0.8500395843530022	0.5507936976263885	T	T	T
0.5911733078737784	0.8190275411617618	0.4378918491363379	T	T	T
0.8264928691387370	0.5723294221631429	0.5408782970138555	T	T	T
0.8405079086185920	0.0996536873927830	0.4492718576534137	T	T	T
0.9983883361179768	0.4779582946175980	0.4788900277114232	T	T	T
0.6878863026802703	0.1779052092235466	0.5109670036385096	T	T	T
0.3452132231934866	0.5925806171354844	0.5418931300714772	T	T	T
0.3373478236097863	0.0604649733984651	0.4481682149611742	T	T	T
0.0844924296010247	0.0687943446744618	0.5512834788980031	T	T	T
0.5960694401334049	0.5869793339027569	0.4376635153986454	T	T	T
0.6113465311042646	0.8175631514786346	0.5413126907656307	T	T	T
0.0671814056675110	0.8330086195342993	0.4497305522627146	T	T	T
0.5330357037844031	0.9882879382343780	0.4787671336170644	T	T	T
0.1432367639440039	0.6748704469240598	0.5109463803239942	T	T	T
0.0719461091680611	0.3297778024734172	0.5422727155386010	T	T	T
0.6099365536250619	0.3296588779808518	0.4475443792838331	T	T	T
0.8559174157746791	0.0753745704922338	0.5543897563084966	T	T	T
0.8272750730951558	0.5900975112832058	0.4376810432536119	T	T	T
0.5870775730215472	0.5942383782784488	0.5416729730345109	T	T	T
0.1052609773159729	0.0606765291652588	0.4496300735779758	T	T	T
0.6207110754162842	0.3424744610186433	0.5611884077185411	T	T	T
0.8623089426688795	0.0625629567901143	0.5760890522771152	T	T	T
0.6242105876699354	0.3497604314438134	0.5829047481428148	T	T	T

**2H<sub>2</sub>O+Indium Tin Oxide 111 surface:**

In Sn O H

1.0000000000000000

14.6581649780000003 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189798837000000 12.7095312472999993 0.0000000000000000

-0.1539904818000000 0.0117322471000000 44.4205346059000021

In Sn O H

56 8 98 4

Selective dynamics

Direct

0.7601300110000011	0.0111199609999986	0.3212997449999975	F	F	F
0.2434165649999969	0.9854015660000002	0.3303952670000001	F	F	F
0.7751763210000036	0.2373103790000002	0.3303952670000001	F	F	F
0.7758184010000022	0.7360378240000003	0.3303952670000001	F	F	F
0.0149432030000014	0.2262095230000014	0.3212997449999975	F	F	F
0.9921246899999971	0.7693967209999997	0.3303952670000001	F	F	F
0.4928005430000013	0.7693967209999997	0.3303952670000001	F	F	F
0.0028580700000020	0.4978031030000025	0.3258475270000005	F	F	F
0.5041760359999969	0.9965305489999992	0.3258475270000005	F	F	F
0.5754696389999978	0.3201690450000001	0.3988024339999967	F	F	F
0.1000335600000000	0.3427603160000032	0.3893470450000009	F	F	F
0.5996578370000023	0.8418218679999967	0.3888098850000006	F	F	F
0.0767109720000008	0.8183099729999981	0.3986376789999966	F	F	F
0.1114318609999998	0.5689321970000023	0.3988024339999967	F	F	F
0.5634797049999989	0.0941582849999989	0.3893470450000009	F	F	F
0.5641186730000030	0.5925506089999999	0.3888098850000006	F	F	F
0.1114494420000014	0.0701311669999996	0.3986376789999966	F	F	F
0.3261319590000014	0.1051290999999992	0.3988024339999967	F	F	F
0.3492093770000011	0.5573703139999964	0.3893470450000009	F	F	F
0.8488609910000022	0.5573744860000005	0.3888098850000006	F	F	F
0.8248676340000003	0.1057902270000000	0.3986376789999966	F	F	F
0.3383793029999964	0.8302004350000018	0.3937513699999968	F	F	F
0.8367797049999979	0.3315350439999989	0.3937513699999968	F	F	F
0.7420985669999993	0.4866741200000035	0.3303952670000001	F	F	F
0.3376278109999973	0.3314195660000010	0.3942364460000007	F	F	F
0.8376410449999980	0.8299810290000025	0.3937513699999968	F	F	F
0.7639705255969422	0.0034794317205695	0.5248252552722655	T	T	T
0.9107410976162740	0.6494111958225804	0.4637065476672530	T	T	T
0.4319665142592354	0.6742161915139266	0.4566565712510678	T	T	T
0.9328211692597383	0.1760288790476442	0.4570310232826590	T	T	T
0.4079036930703649	0.1535338859619266	0.4665222138817400	T	T	T
0.2454342942251024	0.7477969515305418	0.5244074713185854	T	T	T
0.4441018242898551	0.9038616117043732	0.4659429695689925	T	T	T

0.9028017582343467	0.4232551440414465	0.4566396157094034	T	T	T
0.7676348873329391	0.2502591524969600	0.5335143642248674	T	T	T
0.8989074364950588	0.9256092056299575	0.4567938971098363	T	T	T
0.4467537942570619	0.4008539570903005	0.4664994690277501	T	T	T
0.2263581875999879	0.2634476939600633	0.5228307498530078	T	T	T
0.0150290037763820	0.2302540215086665	0.5267386844018801	T	T	T
0.6582106776150131	0.4393211099039652	0.4637283860898094	T	T	T
0.6827619376827624	0.8926595699240537	0.4557751513437889	T	T	T
0.1826185428585200	0.8895233714637996	0.4560740020653922	T	T	T
0.1607165600341713	0.4388461745706175	0.4665286244341810	T	T	T
0.5220122126222410	0.2177595251050583	0.5231482788253138	T	T	T
0.6701637124161509	0.6659853983376748	0.4600117652909397	T	T	T
0.0069873102990937	0.5031904078088718	0.5307428236926376	T	T	T
0.6742220531573505	0.1622486649668923	0.4616149781899727	T	T	T
0.5146890233001640	0.4881325801327955	0.5306563444403981	T	T	T
0.1695751125890548	0.1648816641999999	0.4616397261186507	T	T	T
0.5161304191955779	0.9917200718573305	0.5277362145749843	T	T	T
0.1710205555750540	0.6652293823626929	0.4614711406448285	T	T	T
0.2400196615029175	0.9813549319422417	0.5301282659348397	T	T	T
0.2719629524618298	0.5110019496145995	0.5229009811035631	T	T	T
0.9925429243136311	0.7590362076898868	0.5342594424852440	T	T	T
0.2318915720000021	0.7582958650000009	0.3212997449999975	F	F	F
0.5035339559999983	0.4978031030000025	0.3258475270000005	F	F	F
0.2312494130000005	0.2595683819999977	0.3212997449999975	F	F	F
0.5142674240000034	0.2262095040000034	0.3212997449999975	F	F	F
0.2649692749999986	0.5089321609999971	0.3212997449999975	F	F	F
0.0035676700000025	0.9990756250000032	0.3258475270000005	F	F	F
0.7470734657613546	0.4899935603316254	0.5301938379247912	T	T	T
0.7751282055706948	0.7363128932820537	0.5301225789102920	T	T	T
0.4981246744705194	0.7646585113335728	0.5327984581969092	T	T	T
0.0051670421885755	0.0021384522068079	0.5281986062571353	T	T	T
0.8197246590000020	0.8569508429999999	0.3438201640000003	F	F	F
0.3987081670000023	0.9354814869999970	0.3117293459999999	F	F	F
0.9209922539999980	0.1532890789999968	0.3018949180000021	F	F	F
0.1730363100000005	0.4314418040000021	0.3139001839999978	F	F	F
0.3283148679999996	0.8129202289999995	0.3438201640000003	F	F	F
0.6696297120000025	0.3927234279999965	0.3117293459999999	F	F	F
0.9299447499999971	0.9155171419999988	0.3018949180000021	F	F	F
0.4004008089999971	0.1679411770000030	0.3139001839999978	F	F	F
0.8631193249999995	0.3221544190000003	0.3438201640000003	F	F	F
0.9417661310000014	0.6640191489999978	0.3117293459999999	F	F	F
0.1588438120000006	0.9234787780000033	0.3018949180000021	F	F	F
0.4368057220000026	0.3953728259999991	0.3139001839999978	F	F	F
0.1873433459999987	0.1386553729999989	0.3078748470000008	F	F	F



0.6083596860000000	0.0601247049999998	0.3399656449999995	F	F	F
0.0860756719999998	0.8423171000000025	0.3498000940000026	F	F	F
0.8340316199999975	0.5641643649999963	0.3377948270000033	F	F	F
0.6787528939999987	0.1826860150000016	0.3078748470000008	F	F	F
0.3374381340000028	0.6028827789999980	0.3399656449999995	F	F	F
0.0771230949999975	0.0800890829999972	0.3498000940000026	F	F	F
0.6066670510000023	0.8276650669999981	0.3377948270000033	F	F	F
0.1439485069999975	0.6734517499999981	0.3078748470000008	F	F	F
0.0653017340000019	0.3315870200000006	0.3399656449999995	F	F	F
0.8482241079999966	0.0721274100000002	0.3498000940000026	F	F	F
0.5702620779999990	0.6002333420000028	0.3377948270000033	F	F	F
0.5198188029999997	0.4710367289999979	0.3758420030000025	F	F	F
0.9426806099999965	0.3924763870000021	0.4077528669999992	F	F	F
0.4180544709999978	0.1777170419999976	0.4180630740000026	F	F	F
0.1697175740000034	0.8957742600000032	0.4059099489999980	F	F	F
0.0157015099999995	0.5134525650000015	0.3758420030000025	F	F	F
0.6712180939999968	0.9354948960000016	0.4077528669999992	F	F	F
0.4114658740000010	0.4116378180000027	0.4180630740000026	F	F	F
0.9398975889999974	0.1628324400000025	0.4059099489999980	F	F	F
0.4767584659999997	0.0098831760000024	0.3758420030000025	F	F	F
0.3993614999999977	0.6636584279999980	0.4077528669999992	F	F	F
0.1841461659999979	0.4047562530000022	0.4180630740000026	F	F	F
0.9035842740000035	0.9330345110000025	0.4059099489999980	F	F	F
0.1547643999999977	0.1916458330000026	0.4119880140000021	F	F	F
0.7307997249999971	0.2707766190000029	0.3797524499999980	F	F	F
0.2566607179999991	0.4851340860000022	0.3698926240000020	F	F	F
0.5066994279999975	0.7643982149999999	0.3817393400000029	F	F	F
0.6603693220000011	0.1487234940000022	0.4119880140000021	F	F	F
0.0053115979999987	0.7243880719999964	0.3797524499999980	F	F	F
0.2643070809999983	0.2506682470000001	0.3698926240000020	F	F	F
0.7342340009999972	0.4998948420000033	0.3817393400000029	F	F	F
0.1983331229999976	0.6537793850000000	0.4119880140000021	F	F	F
0.2762958710000021	0.9991835909999978	0.3797524499999980	F	F	F
0.4911154050000022	0.2586069589999980	0.3698926240000020	F	F	F
0.7714716719999970	0.7274976870000032	0.3817393400000029	F	F	F
0.8217399443824909	0.8445370309670617	0.5441289458983473	T	T	T
0.8547062811636078	0.8032343334412330	0.4434058131340041	T	T	T
0.2766441895917506	0.7257492920862533	0.4750007898213772	T	T	T
0.4056373397412386	0.9339516796862477	0.5167421047332658	T	T	T
0.7557876181304992	0.5138450154872161	0.4848104400926874	T	T	T
0.9221571735087293	0.1499044724482664	0.5068423360037236	T	T	T
0.5044559236563504	0.2267054174158241	0.4735701872289388	T	T	T
0.1800356114361212	0.4345053730253434	0.5189750437000138	T	T	T
0.3369212208842882	0.8139924921532972	0.5432841412834667	T	T	T

0.3488324154217526	0.8470342924430412	0.4438807375073738	T	T	T
0.0036689852994882	0.2675625673005285	0.4763090285258825	T	T	T
0.6759720091619406	0.4009611434053461	0.5110094527300237	T	T	T
0.7395582490814747	0.7484885281669814	0.4847523278616764	T	T	T
0.9330460721366194	0.9235211905244726	0.5080121830447109	T	T	T
0.2761007564467969	0.4962437668220597	0.4732651747177492	T	T	T
0.3975346728738460	0.1668364346375780	0.5205477312200024	T	T	T
0.8532418742155053	0.3366338671961828	0.5442565340881270	T	T	T
0.8117146007955647	0.3417433322177157	0.4434769134328926	T	T	T
0.7361262716083395	0.9946325093924722	0.4755758799507948	T	T	T
0.9330941520367882	0.6661653233917869	0.5111854891832867	T	T	T
0.5171404979474922	0.7375530586698424	0.4862066164616818	T	T	T
0.1504630224783464	0.9173152152066918	0.5053345122132658	T	T	T
0.2373539410739301	0.2684313880211079	0.4734574075721097	T	T	T
0.4433545763101348	0.3858608756087858	0.5185273798878630	T	T	T
0.4878608770435631	0.5230254939497765	0.4796080542965258	T	T	T
0.1877808547747525	0.1364130751430420	0.5114632793242244	T	T	T
0.6069537418099628	0.0619986255207131	0.5425225029242006	T	T	T
0.0679610954717491	0.6022374347494556	0.4474839158977964	T	T	T
0.0750445387517675	0.8502451446986955	0.5548438034415659	T	T	T
0.5884133856317614	0.8201566290579860	0.4374149648774323	T	T	T
0.8265988500189644	0.5763587219427719	0.5408553496443065	T	T	T
0.8420295213268855	0.0971650482869232	0.4496678068582453	T	T	T
0.9985145859751503	0.4786712038915131	0.4797210469321442	T	T	T
0.6893080613523983	0.1751101065980035	0.5114428108460526	T	T	T
0.3483671732220122	0.5906456551071810	0.5420363602181367	T	T	T
0.3366532519104871	0.0603443183512943	0.4480070790604437	T	T	T
0.0806719052730237	0.0692629115118877	0.5508955684106341	T	T	T
0.5960840243992285	0.5860997134349523	0.4373963055437255	T	T	T
0.6120404684639037	0.8180402845399440	0.5410000514591828	T	T	T
0.0672074175739384	0.8329779076002519	0.4497700935803806	T	T	T
0.5318615981767091	0.9891661064277939	0.4786602174559813	T	T	T
0.1444178217051190	0.6791659223235204	0.5118761981098265	T	T	T
0.0700567310137285	0.3372973639168889	0.5419424076134794	T	T	T
0.6103868212194952	0.3288980731710757	0.4476217086756698	T	T	T
0.8554827269816121	0.0758025609340026	0.5548383709487622	T	T	T
0.8249629205888838	0.5894935762186420	0.4371395435432012	T	T	T
0.5879128320137462	0.5932629322226302	0.5417151619515665	T	T	T
0.1052390973012288	0.0600910635197273	0.4498593209325323	T	T	T
0.6202664125728243	0.3428339292406924	0.5616445406759425	T	T	T
0.0409572884073298	0.6121780784189637	0.5619275815717233	T	T	T
0.8625429254776595	0.0658520152430336	0.5766461021748798	T	T	T
0.6261690417398700	0.3541516823047472	0.5830157901812925	T	T	T
0.0328314143648956	0.6133449079000337	0.5837012336934482	T	T	T

0.0863860406350398 0.8550451423008540 0.5763503128632314 T T T

**3H<sub>2</sub>O+Indium Tin Oxide 111 surface:**

In Sn O H

1.0000000000000000

14.6581649780000003 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189798837000000 12.7095312472999993 0.0000000000000000

-0.1539904818000000 0.0117322471000000 44.4205346059000021

In Sn O H

56 8 99 6

Selective dynamics

Direct

0.7601300110000011	0.0111199609999986	0.3212997449999975	F	F	F
0.2434165649999969	0.9854015660000002	0.3303952670000001	F	F	F
0.7751763210000036	0.2373103790000002	0.3303952670000001	F	F	F
0.7758184010000022	0.7360378240000003	0.3303952670000001	F	F	F
0.0149432030000014	0.2262095230000014	0.3212997449999975	F	F	F
0.9921246899999971	0.7693967209999997	0.3303952670000001	F	F	F
0.4928005430000013	0.7693967209999997	0.3303952670000001	F	F	F
0.0028580700000020	0.4978031030000025	0.3258475270000005	F	F	F
0.5041760359999969	0.9965305489999992	0.3258475270000005	F	F	F
0.5754696389999978	0.3201690450000001	0.3988024339999967	F	F	F
0.1000335600000000	0.3427603160000032	0.3893470450000009	F	F	F
0.5996578370000023	0.8418218679999967	0.3888098850000006	F	F	F
0.0767109720000008	0.8183099729999981	0.3986376789999966	F	F	F
0.1114318609999998	0.5689321970000023	0.3988024339999967	F	F	F
0.5634797049999989	0.0941582849999989	0.3893470450000009	F	F	F
0.5641186730000030	0.5925506089999999	0.3888098850000006	F	F	F
0.1114494420000014	0.0701311669999996	0.3986376789999966	F	F	F
0.3261319590000014	0.1051290999999992	0.3988024339999967	F	F	F
0.3492093770000011	0.5573703139999964	0.3893470450000009	F	F	F
0.8488609910000022	0.5573744860000005	0.3888098850000006	F	F	F
0.8248676340000003	0.1057902270000000	0.3986376789999966	F	F	F
0.3383793029999964	0.8302004350000018	0.3937513699999968	F	F	F
0.8367797049999979	0.3315350439999989	0.3937513699999968	F	F	F
0.7420985669999993	0.4866741200000035	0.3303952670000001	F	F	F
0.3376278109999973	0.3314195660000010	0.3942364460000007	F	F	F
0.8376410449999980	0.8299810290000025	0.3937513699999968	F	F	F
0.7639023445892688	0.0036577897800943	0.5247706516070749	T	T	T
0.9107490547539745	0.6494717842791353	0.4636948715956838	T	T	T
0.4317843112969845	0.6744045433216476	0.4566345639586002	T	T	T
0.9322488391641918	0.1763560158771794	0.4569976978431151	T	T	T
0.4077355209495507	0.1536425738196650	0.4664974279619952	T	T	T

0.2456387139909416	0.7480747580270791	0.5244282288080450	T	T	T
0.4444466511160091	0.9038117159521831	0.4656975976014177	T	T	T
0.9025603464232995	0.4234075400919611	0.4565912087391916	T	T	T
0.7669346818214848	0.2504724054092917	0.5335601070440286	T	T	T
0.8989940078582322	0.9257813675328462	0.4567899303413052	T	T	T
0.4466175903968347	0.4009698830437917	0.4665038578487097	T	T	T
0.2262016412207721	0.2628118913297789	0.5227836685767796	T	T	T
0.0133926482517549	0.2312095589274526	0.5266474178064253	T	T	T
0.6579526149508118	0.4394897693233162	0.4637216545919193	T	T	T
0.6829949995310680	0.8926447314616035	0.4557540883301512	T	T	T
0.1823828813474573	0.8901685075700277	0.4563244008059623	T	T	T
0.1606980515731221	0.4386479738315361	0.4664926910690749	T	T	T
0.5216841056681025	0.2179506388603908	0.5231509839822995	T	T	T
0.6703348998366431	0.6658539395079827	0.4599678626239723	T	T	T
0.0069798245076412	0.5028188462607758	0.5306189100528368	T	T	T
0.6740087187166465	0.1623588397876973	0.4615901382019257	T	T	T
0.5142178637604606	0.4881804422511217	0.5306574465313993	T	T	T
0.1692435376056129	0.1645823796073810	0.4616685028584129	T	T	T
0.5165620983926553	0.9915607029115406	0.5275538271220227	T	T	T
0.1709474147350480	0.6653139128821586	0.4614840410821864	T	T	T
0.2443403289969811	0.9814296443392583	0.5305705275826519	T	T	T
0.2715420225233560	0.5110089205032953	0.5229349348823460	T	T	T
0.9925449680867453	0.7588205862899871	0.5342862496474875	T	T	T
0.2318915720000021	0.7582958650000009	0.3212997449999975	F	F	F
0.5035339559999983	0.4978031030000025	0.3258475270000005	F	F	F
0.2312494130000005	0.2595683819999977	0.3212997449999975	F	F	F
0.5142674240000034	0.2262095040000034	0.3212997449999975	F	F	F
0.2649692749999986	0.5089321609999971	0.3212997449999975	F	F	F
0.0035676700000025	0.9990756250000032	0.3258475270000005	F	F	F
0.7468420193390932	0.4899966094503708	0.5302083073963874	T	T	T
0.7752405554896954	0.7361450321993823	0.5301612683515387	T	T	T
0.4991801476292760	0.7638098070034366	0.5325414945591008	T	T	T
0.0044230089918316	0.0028907294606931	0.5283677690601168	T	T	T
0.8197246590000020	0.8569508429999999	0.3438201640000003	F	F	F
0.3987081670000023	0.9354814869999970	0.3117293459999999	F	F	F
0.9209922539999980	0.1532890789999968	0.3018949180000021	F	F	F
0.1730363100000005	0.4314418040000021	0.3139001839999978	F	F	F
0.3283148679999996	0.8129202289999995	0.3438201640000003	F	F	F
0.6696297120000025	0.3927234279999965	0.3117293459999999	F	F	F
0.9299447499999971	0.9155171419999988	0.3018949180000021	F	F	F
0.4004008089999971	0.1679411770000030	0.3139001839999978	F	F	F
0.8631193249999995	0.3221544190000003	0.3438201640000003	F	F	F
0.9417661310000014	0.6640191489999978	0.3117293459999999	F	F	F
0.1588438120000006	0.9234787780000033	0.3018949180000021	F	F	F

0.4368057220000026	0.3953728259999991	0.3139001839999978	F	F	F
0.1873433459999987	0.1386553729999989	0.3078748470000008	F	F	F
0.6083596860000000	0.0601247049999998	0.3399656449999995	F	F	F
0.0860756719999998	0.8423171000000025	0.3498000940000026	F	F	F
0.8340316199999975	0.5641643649999963	0.3377948270000033	F	F	F
0.6787528939999987	0.1826860150000016	0.3078748470000008	F	F	F
0.3374381340000028	0.6028827789999980	0.3399656449999995	F	F	F
0.0771230949999975	0.0800890829999972	0.3498000940000026	F	F	F
0.6066670510000023	0.8276650669999981	0.3377948270000033	F	F	F
0.1439485069999975	0.6734517499999981	0.3078748470000008	F	F	F
0.0653017340000019	0.3315870200000006	0.3399656449999995	F	F	F
0.8482241079999966	0.0721274100000002	0.3498000940000026	F	F	F
0.5702620779999990	0.6002333420000028	0.3377948270000033	F	F	F
0.5198188029999997	0.4710367289999979	0.3758420030000025	F	F	F
0.9426806099999965	0.3924763870000021	0.4077528669999992	F	F	F
0.4180544709999978	0.1777170419999976	0.4180630740000026	F	F	F
0.1697175740000034	0.8957742600000032	0.4059099489999980	F	F	F
0.0157015099999995	0.5134525650000015	0.3758420030000025	F	F	F
0.6712180939999968	0.9354948960000016	0.4077528669999992	F	F	F
0.4114658740000010	0.4116378180000027	0.4180630740000026	F	F	F
0.9398975889999974	0.1628324400000025	0.4059099489999980	F	F	F
0.4767584659999997	0.0098831760000024	0.3758420030000025	F	F	F
0.3993614999999977	0.6636584279999980	0.4077528669999992	F	F	F
0.1841461659999979	0.4047562530000022	0.4180630740000026	F	F	F
0.9035842740000035	0.9330345110000025	0.4059099489999980	F	F	F
0.1547643999999977	0.1916458330000026	0.4119880140000021	F	F	F
0.7307997249999971	0.2707766190000029	0.3797524499999980	F	F	F
0.2566607179999991	0.4851340860000022	0.3698926240000020	F	F	F
0.5066994279999975	0.7643982149999999	0.3817393400000029	F	F	F
0.6603693220000011	0.1487234940000022	0.4119880140000021	F	F	F
0.0053115979999987	0.7243880719999964	0.3797524499999980	F	F	F
0.2643070809999983	0.2506682470000001	0.3698926240000020	F	F	F
0.7342340009999972	0.4998948420000033	0.3817393400000029	F	F	F
0.1983331229999976	0.6537793850000000	0.4119880140000021	F	F	F
0.2762958710000021	0.9991835909999978	0.3797524499999980	F	F	F
0.4911154050000022	0.2586069589999980	0.3698926240000020	F	F	F
0.7714716719999970	0.7274976870000032	0.3817393400000029	F	F	F
0.8219838497958203	0.8445958751302698	0.5440728611377511	T	T	T
0.8547938508991844	0.8032427875705989	0.4433921181265539	T	T	T
0.2762760762199901	0.7264051090613424	0.4751314930420265	T	T	T
0.4075694518352529	0.9325957817218613	0.5161420167985555	T	T	T
0.7556380500149806	0.5137820675245879	0.4848328295502471	T	T	T
0.9218624500897955	0.1501501012167348	0.5068382299155951	T	T	T
0.5041194325497450	0.2270408381723689	0.4735755968723581	T	T	T

0.1801035984378570	0.4338092945715911	0.5187722373375678	T	T	T
0.3388472121037805	0.8121739429599721	0.5432723617488133	T	T	T
0.3487317354629436	0.8471135553726178	0.4438929476655685	T	T	T
0.0029587772536299	0.2677469969753448	0.4763725021315248	T	T	T
0.6758120282975456	0.4010903936945382	0.5110029714826982	T	T	T
0.7395481216996062	0.7484929719365973	0.4847550696401786	T	T	T
0.9331237853211755	0.9243130554043787	0.5079891553020069	T	T	T
0.2759814475303065	0.4964253174099567	0.4733087025850323	T	T	T
0.3974805876576313	0.1664980615151523	0.5203441540613449	T	T	T
0.8521946703141736	0.3369268589203690	0.5447005208143237	T	T	T
0.8114581544630791	0.3420228473275833	0.4434323021547925	T	T	T
0.7363475903231941	0.9946646372915438	0.4755234900237011	T	T	T
0.9332736521605267	0.6658977058750478	0.5111836452910758	T	T	T
0.5174794281710353	0.7373091168762819	0.4860754156732159	T	T	T
0.1505390294070711	0.9197220369736970	0.5060132916714435	T	T	T
0.2368420923129121	0.2680186550957027	0.4733905897614155	T	T	T
0.4429416901121237	0.3860714813657714	0.5185748539916193	T	T	T
0.4875876033070727	0.5232955157173826	0.4796398930846217	T	T	T
0.1866739033495363	0.1361707919293276	0.5115304118526209	T	T	T
0.6068878598420354	0.0620594639891230	0.5424357993040503	T	T	T
0.0679750746329302	0.6022075525050524	0.4474842992343759	T	T	T
0.0743309294456310	0.8506096910224611	0.5551550455136426	T	T	T
0.5886666429404387	0.8199595190029600	0.4373747425559015	T	T	T
0.8266831023212105	0.5758911128473659	0.5408623834662538	T	T	T
0.8418565862731944	0.0973076962096402	0.4496618264795878	T	T	T
0.9983843006581045	0.4786203319408781	0.4796366096287081	T	T	T
0.6890028748033123	0.1753932664252486	0.5113715916175284	T	T	T
0.3479619249391827	0.5906961736158732	0.5421004287710993	T	T	T
0.3364227263348445	0.0604268932581422	0.4480067669248570	T	T	T
0.0752322709697148	0.0728378778705210	0.5518694848046454	T	T	T
0.5960119075148885	0.5861475401927226	0.4373918361479290	T	T	T
0.6119506964923255	0.8180343085625247	0.5410755090223578	T	T	T
0.0673267522017894	0.8332208109392901	0.4498247078980991	T	T	T
0.5320078310499464	0.9893420567384269	0.4784487818847436	T	T	T
0.1442520301147728	0.6796191794040471	0.5119419984011490	T	T	T
0.0696575249334734	0.3370491049685350	0.5418217268373254	T	T	T
0.6103688633222809	0.3289282307432398	0.4476216381475008	T	T	T
0.8541571297551636	0.0762254999333619	0.5548622144342854	T	T	T
0.8249937083157893	0.5894727512815843	0.4371262601107036	T	T	T
0.5878027563055644	0.5932544948610401	0.5417283335118578	T	T	T
0.1046769872476986	0.0603313639662583	0.4498436588482785	T	T	T
0.6197328716147155	0.3430467974653386	0.5616927702340276	T	T	T
0.0411668987035486	0.6111258448605470	0.5619493335447641	T	T	T
0.2467218250169694	0.0173349123513547	0.5822655267507456	T	T	T

0.8604852820984034	0.0664144562919390	0.5766733853020359	T	T	T
0.6261346703558585	0.3548078578746707	0.5830002798339874	T	T	T
0.0322675720211248	0.6122318368047110	0.5836919063638576	T	T	T
0.0830092892571545	0.8547578664897664	0.5768459076281401	T	T	T
0.1687045682953277	0.0442309338301983	0.5801273776530265	T	T	T
0.2776024712561709	0.9480781254937771	0.5917204751991830	T	T	T

**4H<sub>2</sub>O+Indium Tin Oxide 111 surface:**

In Sn O H

1.0000000000000000

14.6581649780000003 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189798837000000 12.7095312472999993 0.0000000000000000

-0.1539904818000000 0.0117322471000000 44.4205346059000021

In Sn O H

56 8 100 8

Selective dynamics

Direct

0.7601300110000011	0.0111199609999986	0.3212997449999975	F	F	F
0.2434165649999969	0.9854015660000002	0.3303952670000001	F	F	F
0.7751763210000036	0.2373103790000002	0.3303952670000001	F	F	F
0.7758184010000022	0.7360378240000003	0.3303952670000001	F	F	F
0.0149432030000014	0.2262095230000014	0.3212997449999975	F	F	F
0.9921246899999971	0.7693967209999997	0.3303952670000001	F	F	F
0.4928005430000013	0.7693967209999997	0.3303952670000001	F	F	F
0.0028580700000020	0.4978031030000025	0.3258475270000005	F	F	F
0.5041760359999969	0.9965305489999992	0.3258475270000005	F	F	F
0.5754696389999978	0.3201690450000001	0.3988024339999967	F	F	F
0.1000335600000000	0.3427603160000032	0.3893470450000009	F	F	F
0.5996578370000023	0.8418218679999967	0.3888098850000006	F	F	F
0.0767109720000008	0.8183099729999981	0.3986376789999966	F	F	F
0.1114318609999998	0.5689321970000023	0.3988024339999967	F	F	F
0.5634797049999989	0.0941582849999989	0.3893470450000009	F	F	F
0.5641186730000030	0.5925506089999999	0.3888098850000006	F	F	F
0.1114494420000014	0.0701311669999996	0.3986376789999966	F	F	F
0.3261319590000014	0.1051290999999992	0.3988024339999967	F	F	F
0.3492093770000011	0.5573703139999964	0.3893470450000009	F	F	F
0.8488609910000022	0.5573744860000005	0.3888098850000006	F	F	F
0.8248676340000003	0.1057902270000000	0.3986376789999966	F	F	F
0.3383793029999964	0.8302004350000018	0.3937513699999968	F	F	F
0.8367797049999979	0.3315350439999989	0.3937513699999968	F	F	F
0.7420985669999993	0.4866741200000035	0.3303952670000001	F	F	F
0.3376278109999973	0.3314195660000010	0.3942364460000007	F	F	F

0.8376410449999980	0.8299810290000025	0.3937513699999968	F	F	F
0.7684703366402443	0.0007163565052908	0.5253491544458747	T	T	T
0.9114664262176225	0.6487323985436337	0.4633747583523468	T	T	T
0.43090659304440823	0.6776487420031312	0.4558275236538868	T	T	T
0.9337586153111300	0.1749526482199633	0.4567244757897084	T	T	T
0.4085830384595559	0.1549650845294073	0.4666209413000390	T	T	T
0.2402934570963801	0.7532877950242860	0.5243201238716987	T	T	T
0.4447679682864390	0.9050965374245235	0.4653115083238150	T	T	T
0.9024546564472261	0.4226687405061789	0.4567100027230573	T	T	T
0.7740176128896215	0.2506845295840101	0.5299765508756500	T	T	T
0.8994867679436432	0.9252591795596061	0.4567265575159689	T	T	T
0.4466645671200992	0.3998784849155441	0.4665253085363470	T	T	T
0.2283248614569013	0.2631137689312404	0.5231295619400264	T	T	T
0.0171036960738702	0.2305635990260932	0.5263549065939624	T	T	T
0.6580059002055701	0.4393724543131747	0.4648194331546654	T	T	T
0.6834936943899177	0.8930298427010843	0.4557222418665604	T	T	T
0.1818286179527899	0.8905774921013041	0.4562350981341229	T	T	T
0.1610815456608299	0.4387141543615389	0.4663807631833222	T	T	T
0.5229142197117015	0.2209441594238130	0.5251151619664508	T	T	T
0.6703568847815546	0.6655265537207982	0.4598241188823842	T	T	T
0.0084931405310913	0.5030721210567628	0.5305663348030548	T	T	T
0.6741253354171619	0.1617117432389967	0.4619531068128532	T	T	T
0.4981500503707628	0.5122115932326707	0.5271296433900668	T	T	T
0.1701534381098806	0.1649198527970929	0.4615779130507533	T	T	T
0.5172878905116124	0.9926537147989234	0.5272314226663114	T	T	T
0.1718436637101731	0.6654196718548105	0.4611652837272915	T	T	T
0.2432633027735991	0.9827271136318327	0.5307974041467134	T	T	T
0.2704470663990187	0.5126246290259060	0.5229337066224334	T	T	T
0.9931928337662996	0.7584267858120373	0.5332973224456258	T	T	T
0.2318915720000021	0.7582958650000009	0.3212997449999975	F	F	F
0.5035339559999983	0.4978031030000025	0.3258475270000005	F	F	F
0.2312494130000005	0.2595683819999977	0.3212997449999975	F	F	F
0.5142674240000034	0.2262095040000034	0.3212997449999975	F	F	F
0.2649692749999986	0.5089321609999971	0.3212997449999975	F	F	F
0.0035676700000025	0.9990756250000032	0.3258475270000005	F	F	F
0.7451000255285073	0.4952045866124838	0.5313781176958858	T	T	T
0.7755073395878087	0.7365137009754426	0.5297860799616292	T	T	T
0.4969700145314243	0.7691821124032460	0.5317379622219919	T	T	T
0.0041117967059642	0.9994642068569712	0.5293295588410299	T	T	T
0.8197246590000020	0.8569508429999999	0.3438201640000003	F	F	F
0.3987081670000023	0.9354814869999970	0.3117293459999999	F	F	F
0.9209922539999980	0.1532890789999968	0.3018949180000021	F	F	F
0.1730363100000005	0.4314418040000021	0.3139001839999978	F	F	F
0.3283148679999996	0.8129202289999995	0.3438201640000003	F	F	F



0.6696297120000025	0.3927234279999965	0.3117293459999999	F	F	F
0.9299447499999971	0.9155171419999988	0.3018949180000021	F	F	F
0.4004008089999971	0.1679411770000030	0.3139001839999978	F	F	F
0.8631193249999995	0.3221544190000003	0.3438201640000003	F	F	F
0.9417661310000014	0.6640191489999978	0.3117293459999999	F	F	F
0.1588438120000006	0.9234787780000033	0.3018949180000021	F	F	F
0.4368057220000026	0.3953728259999991	0.3139001839999978	F	F	F
0.1873433459999987	0.1386553729999989	0.3078748470000008	F	F	F
0.6083596860000000	0.0601247049999998	0.3399656449999995	F	F	F
0.0860756719999998	0.8423171000000025	0.3498000940000026	F	F	F
0.8340316199999975	0.5641643649999963	0.3377948270000033	F	F	F
0.6787528939999987	0.1826860150000016	0.3078748470000008	F	F	F
0.3374381340000028	0.6028827789999980	0.3399656449999995	F	F	F
0.0771230949999975	0.0800890829999972	0.3498000940000026	F	F	F
0.6066670510000023	0.8276650669999981	0.3377948270000033	F	F	F
0.1439485069999975	0.6734517499999981	0.3078748470000008	F	F	F
0.0653017340000019	0.3315870200000006	0.3399656449999995	F	F	F
0.8482241079999966	0.0721274100000002	0.3498000940000026	F	F	F
0.5702620779999990	0.6002333420000028	0.3377948270000033	F	F	F
0.5198188029999997	0.4710367289999979	0.3758420030000025	F	F	F
0.9426806099999965	0.3924763870000021	0.4077528669999992	F	F	F
0.4180544709999978	0.1777170419999976	0.4180630740000026	F	F	F
0.1697175740000034	0.8957742600000032	0.4059099489999980	F	F	F
0.0157015099999995	0.5134525650000015	0.3758420030000025	F	F	F
0.6712180939999968	0.9354948960000016	0.4077528669999992	F	F	F
0.4114658740000010	0.4116378180000027	0.4180630740000026	F	F	F
0.9398975889999974	0.1628324400000025	0.4059099489999980	F	F	F
0.4767584659999997	0.0098831760000024	0.3758420030000025	F	F	F
0.3993614999999977	0.6636584279999980	0.4077528669999992	F	F	F
0.1841461659999979	0.4047562530000022	0.4180630740000026	F	F	F
0.9035842740000035	0.9330345110000025	0.4059099489999980	F	F	F
0.1547643999999977	0.1916458330000026	0.4119880140000021	F	F	F
0.7307997249999971	0.2707766190000029	0.3797524499999980	F	F	F
0.2566607179999991	0.4851340860000022	0.3698926240000020	F	F	F
0.5066994279999975	0.7643982149999999	0.3817393400000029	F	F	F
0.6603693220000011	0.1487234940000022	0.4119880140000021	F	F	F
0.0053115979999987	0.7243880719999964	0.3797524499999980	F	F	F
0.2643070809999983	0.2506682470000001	0.3698926240000020	F	F	F
0.7342340009999972	0.4998948420000033	0.3817393400000029	F	F	F
0.1983331229999976	0.6537793850000000	0.4119880140000021	F	F	F
0.2762958710000021	0.9991835909999978	0.3797524499999980	F	F	F
0.4911154050000022	0.2586069589999980	0.3698926240000020	F	F	F
0.7714716719999970	0.7274976870000032	0.3817393400000029	F	F	F
0.8229978862903995	0.8411622369680691	0.5440625588482366	T	T	T

0.8549124345483585	0.8029137906760323	0.4434417180039532	T	T	T
0.2767304801394349	0.7273601014694256	0.4751936064328155	T	T	T
0.4074805516809955	0.9346682582795034	0.5161044876939727	T	T	T
0.7529738495737354	0.5129019213800599	0.4854826686113723	T	T	T
0.9244909495333411	0.1464494517564605	0.5068124239128949	T	T	T
0.5046328883514349	0.2277763269301793	0.4747173712172394	T	T	T
0.1809763621544141	0.4341417566088566	0.5186603579916135	T	T	T
0.3395091416305491	0.8134365707221431	0.5426054934431902	T	T	T
0.3483063768183371	0.8487843435383640	0.4437988912246478	T	T	T
0.0042725091158705	0.2665250061708344	0.4762236948025630	T	T	T
0.6639002750075770	0.4078407953084038	0.5147893954141910	T	T	T
0.7390881476607900	0.7484158772388241	0.4846764970072923	T	T	T
0.9374116083461335	0.9177232159823367	0.5069170780204026	T	T	T
0.2767057955822552	0.4961809685177419	0.4733520016796860	T	T	T
0.3994833647627055	0.1686585802483219	0.5214880302601144	T	T	T
0.8554406787107641	0.3397363653521392	0.5415944311145081	T	T	T
0.8111543394069759	0.3414070711067028	0.4441155942563358	T	T	T
0.7373208257970044	0.9944246711029071	0.4758657414165927	T	T	T
0.9336991938634062	0.6652191938583037	0.5107399596370873	T	T	T
0.5169652176464197	0.7385026555580567	0.4858216766794082	T	T	T
0.1498658749185102	0.9206671115944550	0.5060148867135521	T	T	T
0.2378279129777108	0.2683562699256870	0.4737151056280998	T	T	T
0.4451764676292002	0.3918596476104076	0.5188704551303432	T	T	T
0.4850313880520484	0.5266317193351759	0.4780513591210054	T	T	T
0.1886045337015591	0.1363979930965981	0.5115132464624489	T	T	T
0.6110380076848203	0.0569510768154145	0.5420786093336052	T	T	T
0.0685825946288286	0.6020082273188451	0.4474646518877883	T	T	T
0.0827913730454157	0.8428175026677980	0.5541374418557148	T	T	T
0.5891300108239467	0.8200557748722895	0.4374659371481634	T	T	T
0.8276796388595276	0.5787743825534689	0.5416480180114641	T	T	T
0.8418143214869213	0.0974826650605415	0.4497864403985958	T	T	T
0.9987072101539147	0.4777623183988567	0.4795428525121094	T	T	T
0.6905412649090793	0.1752482982393337	0.5119245469085163	T	T	T
0.3394703180902279	0.5984701317488993	0.5432430809975910	T	T	T
0.3368446283639734	0.0615335417043525	0.4482593960185682	T	T	T
0.0756904749940741	0.0727115462794852	0.5516273172283066	T	T	T
0.5968144865881324	0.5850603274653614	0.4376008808487422	T	T	T
0.6113267508947866	0.8185426753531696	0.5407219282148026	T	T	T
0.0678841034487787	0.8331312399063807	0.4495622480286710	T	T	T
0.5320849267371212	0.9905427524611247	0.4783141423869540	T	T	T
0.1444429215461754	0.6791981889842473	0.5108509146662269	T	T	T
0.0720696010027887	0.3370459378327023	0.5420435637273776	T	T	T
0.6107216159367488	0.3289371857638203	0.4482503935708786	T	T	T
0.8716263478777240	0.0356089387567448	0.5565908193432045	T	T	T

0.8249333650855648	0.5887667488388242	0.4373233649108451	T	T	T
0.5816843528988108	0.6031930832355233	0.5416446178284092	T	T	T
0.1055990524830780	0.0601829647641693	0.4499152828821764	T	T	T
0.7356187868931878	0.2318981306787589	0.5755769736025069	T	T	T
0.0454519678662461	0.6116210958498152	0.5613109804627696	T	T	T
0.5534510473017930	0.2363966281748108	0.5759019938504388	T	T	T
0.2450007465621348	0.0251803137930452	0.5820606944198286	T	T	T
0.8349554255841907	0.0993222579932133	0.5696868416536466	T	T	T
0.7520789434038403	0.2734081296308882	0.5893673955547615	T	T	T
0.0339622351689144	0.6151672536633219	0.5829709672664997	T	T	T
0.6206464290708721	0.2412499504841999	0.5775414767111801	T	T	T
0.5785345998975657	0.1609962175780945	0.5789190880991295	T	T	T
0.0853330269817293	0.8493779907134257	0.5759732239864370	T	T	T
0.1672961020087476	0.0501438099249227	0.5801077309523482	T	T	T
0.2763226846314867	0.9603419410113392	0.5938247465294078	T	T	T

---

**Pt-SA on Indium Oxide 111 slab :**

**Site 1 :**

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320 0.0111480013333320 0.4668317439885570 F F F

0.2388520043333315 0.9888520043333315 0.4746588917436156 F F F

0.7388519966666678 0.4888520196666661 0.4746588944350378 F F F

0.2611479936666683 0.5111480166666666 0.4668317466799934 F F F

0.2277039973333359 0.7611480013333320 0.4668317439885570 F F F

0.7722959913333298 0.2388520043333315 0.4746588917436156 F F F

0.7722959836666661 0.7388519966666678 0.4746588944350378 F F F

0.2277039896666651 0.2611479936666683 0.4668317466799934 F F F

0.0111480013333320 0.2277039973333359 0.4668317439885570 F F F

0.9888520043333315 0.7722959913333369 0.4746588917436156 F F F

0.4888520196666661 0.7722959836666661 0.4746588944350378 F F F

0.5111480166666666 0.2277039896666651 0.4668317466799934 F F F

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.4707453188607431 F F F

0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7626379972396837	0.0113183271241107	0.6446995712689224	T	T	T
0.9061287112129606	0.6539323669587855	0.5920785052139937	T	T	T
0.4256040701084874	0.6778278917832814	0.5832730944598655	T	T	T
0.2228844742448002	0.9926944633392432	0.6479519179936868	T	T	T
0.7531300495510946	0.4818375313733190	0.6513929752800744	T	T	T
0.9301263011081387	0.1774885336396966	0.5837420211456767	T	T	T
0.4034140827842384	0.1539872563055177	0.5921082173187148	T	T	T
0.2700420646870269	0.5137482437617774	0.6405935226983008	T	T	T
0.2185265817802941	0.7639483058342321	0.6443435161033690	T	T	T
0.4388451107825219	0.9060257866532755	0.5912754704546104	T	T	T
0.8937703036262709	0.4273842497753450	0.5836297314091791	T	T	T
0.7815119464306247	0.2334818612084372	0.6479985061649839	T	T	T
0.7795748973059109	0.7358006849826083	0.6506326440793688	T	T	T
0.8916293236434116	0.9305872756750584	0.5837198741781474	T	T	T
0.4442384832562811	0.4024058297183776	0.5920240976285281	T	T	T
0.2222032995632633	0.2645284331414163	0.6406502175430032	T	T	T
0.0112051529939146	0.2275732205498290	0.6443650024785388	T	T	T
0.6559284198842804	0.4396918141395458	0.5924854230409938	T	T	T
0.6800008221327943	0.8925481833968182	0.5837473554262635	T	T	T
0.9843793744378172	0.7818659200581777	0.6477321422672567	T	T	T
0.4514488652901837	0.7866302466474905	0.6476765394274483	T	T	T
0.1758751159996289	0.8930426676984178	0.5836206923720909	T	T	T
0.1573934009776011	0.4417952469634360	0.5918507352071211	T	T	T
0.5148401863701042	0.2182590521689610	0.6406652518434371	T	T	T
0.9968944582800462	0.0015633557386727	0.6504075351175649	T	T	T

0.6664998238399238	0.6661927390155847	0.5884237992026249	T	T	T
0.0001132747199963	0.4938382176632998	0.6453771582953937	T	T	T
0.6681619882629968	0.1640196564704939	0.5877610096129062	T	T	T
0.5031180020734194	0.5043986677235516	0.6472677943699361	T	T	T
0.1632890409820706	0.1692076842684087	0.5875156586516802	T	T	T
0.5142976437020943	0.9887173000556098	0.6465540664628920	T	T	T
0.1678295482435377	0.6678763810845323	0.5876946171552465	T	T	T
0.8159583373333348	0.860101333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.860101333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F

0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8228809407859963	0.8515164244240351	0.6607469606058700	T	T	T
0.8506931091092692	0.8045289225340843	0.5723965954626040	T	T	T
0.2725433936954129	0.7273481841671045	0.6003703834868680	T	T	T
0.3914245433737497	0.9484382753661670	0.6358934246952557	T	T	T
0.7480447197711156	0.5126756956956862	0.6093327045729602	T	T	T
0.9251256827486805	0.1515653958297731	0.6250466309744895	T	T	T
0.4941726541059036	0.2324572164412408	0.5980716576797332	T	T	T
0.1758715439136835	0.4373000670295551	0.6393661581331878	T	T	T
0.3041241640530870	0.8321691452978615	0.6630071677370947	T	T	T
0.3422868173615446	0.8510834534784042	0.5722841942213425	T	T	T
0.9995100961855864	0.2740923795371432	0.6002111119911895	T	T	T
0.6639756774322709	0.3959440876589799	0.6352639727312053	T	T	T
0.7397312222316812	0.7470345756973895	0.6091217049513445	T	T	T
0.9228467627879683	0.9267769782573017	0.6250298476370183	T	T	T
0.2751534849810651	0.4943264791580072	0.5980412803405615	T	T	T
0.3913873800606707	0.1692328590523701	0.6395413563295430	T	T	T
0.8560426195821917	0.3228643485477934	0.6616911610485083	T	T	T
0.8052915691111459	0.3446710974933293	0.5724360469846942	T	T	T
0.7258110273957232	-0.0000899880201321	0.6001497320353887	T	T	T
0.9472430604698971	0.6593867967612980	0.6347304344474410	T	T	T
0.5065959339865355	0.7413994495502173	0.6080947659505394	T	T	T
0.1468260536888180	0.9252534279069744	0.6248235535183064	T	T	T
0.2337276596863033	0.2724825456510653	0.5980137153585664	T	T	T
0.4413252454784735	0.3883704940923512	0.6402193541207676	T	T	T
0.4843241446649901	0.5260563392244779	0.6042313953449406	T	T	T
0.1843128154524593	0.1409007820894327	0.6299172074423197	T	T	T
0.6000120733566501	0.0639926946517639	0.6577826901636890	T	T	T
0.0631370816934642	0.6050227166476749	0.5762409934383690	T	T	T
0.0736127773934594	0.8407773199322736	0.6673459962441290	T	T	T
0.586385555926469	0.8207926376440740	0.5673183610077561	T	T	T
0.8400969099508000	0.5665336291330140	0.6599271337104767	T	T	T
0.8349142047106107	0.1019572411951531	0.5773230431115876	T	T	T
0.9945507680323344	0.4804640497484304	0.6027575695694707	T	T	T

0.6743963160948616	0.1854318830937661	0.6303370567084183	T	T	T
0.3397454172228953	0.6006329877869129	0.6570577923826072	T	T	T
0.3323888057415458	0.0626257337064607	0.5761787135403433	T	T	T
0.0764335041122253	0.0823111912361203	0.6674255337946202	T	T	T
0.5920401350463077	0.5862728076965878	0.5674072226322588	T	T	T
0.6186681588114371	0.8313001554573902	0.6660767588256689	T	T	T
0.0624811615191199	0.8346887648648614	0.5773467405481542	T	T	T
0.5262924832381836	0.9886831063216064	0.6038430426125336	T	T	T
0.1406440596675793	0.6730740134215256	0.6305548148754949	T	T	T
0.0690622002751047	0.3335599163507246	0.6578847042974335	T	T	T
0.6055706514170229	0.3326598859114395	0.5762661837888050	T	T	T
0.8377573377540994	0.0841665705563163	0.6672687714244414	T	T	T
0.8214919238446361	0.5920733778523211	0.5673448013649076	T	T	T
0.6007308157830955	0.5616103427921085	0.6715259008188037	T	T	T
0.1018058716480746	0.0635573887274117	0.5772921643096111	T	T	T
0.6136035322280414	0.6939891358997332	0.6725972250613480	T	T	T

**Site 2:**

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F

0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7633150892315403	0.0122314598837639	0.6448144951213741	T	T	T
0.9047924599269944	0.6558219078015639	0.5922770021827607	T	T	T
0.4272600671604242	0.6797264986589299	0.5834837815772084	T	T	T
0.2359425817702546	0.9820417884991154	0.6480521801988139	T	T	T
0.7408828420863347	0.4889349303557693	0.6501956133605747	T	T	T
0.9309599561807252	0.1768906282880209	0.5838481826090232	T	T	T
0.4028159228490518	0.1547787720202747	0.5921163474927390	T	T	T
0.2732839518446841	0.5147406060003870	0.6425572437074191	T	T	T
0.2257421547694772	0.7627229002145524	0.6448960216748788	T	T	T
0.4400083780943891	0.9049202825477325	0.5921412300063423	T	T	T
0.8938471259784970	0.4266405924017357	0.5834246949255067	T	T	T
0.7814355417171845	0.2346210847664983	0.6478667598322793	T	T	T
0.7683027893945601	0.7433921945331655	0.6503244759597806	T	T	T
0.8924908668745422	0.9302706617535970	0.5839221312064451	T	T	T
0.4431688122219830	0.4017188138094788	0.5922322376857867	T	T	T
0.2237071918201229	0.2568383281237311	0.6418193791553131	T	T	T
0.0119646086131961	0.2238873635862745	0.6447151359793274	T	T	T
0.6556277098138983	0.4395507308888259	0.5918422976603879	T	T	T
0.6799126901104958	0.8932792109047133	0.5834483122744293	T	T	T
0.9850151743643627	0.7799163029233281	0.6478947203363761	T	T	T
0.4904740803906282	0.7693601354456839	0.6502982678030198	T	T	T
0.1773517268126192	0.8915140080848067	0.5838916733887362	T	T	T
0.1545045508733355	0.4422130361239863	0.5914918892479203	T	T	T
0.5150756429622135	0.2195776013630634	0.6405258073846775	T	T	T
0.0003632928445076	0.9993230404841604	0.6507672109654350	T	T	T
0.6669656644495341	0.6666577744600866	0.5873730885662493	T	T	T
0.9814679750535767	0.4977084619645613	0.6455034490059288	T	T	T



0.6686115685901224	0.1637912549612500	0.5877796874100324	T	T	T
0.4995774263044878	0.5130182318433473	0.6450270269592761	T	T	T
0.1640635313428349	0.1678996894967963	0.5878105152223178	T	T	T
0.5141602613960204	0.9903881839783808	0.6450586273579172	T	T	T
0.1689460092906756	0.6665288691794746	0.5882317438343257	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F

0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8202535122015970	0.8524553513966755	0.6608921204317444	T	T	T
0.8511620726959184	0.8050715805615916	0.5722273254022159	T	T	T
0.2738608690092809	0.7260101817048877	0.6000078040472737	T	T	T
0.3983332299860955	0.9410782061639862	0.6353810122233420	T	T	T
0.7486814937483339	0.5124229321294247	0.6081227612601556	T	T	T
0.9267273283189952	0.1500226969015250	0.6253372198968898	T	T	T
0.4951897960211654	0.2316335601944707	0.5978677608844372	T	T	T
0.1504694609118845	0.4579994413987721	0.6404124527696908	T	T	T
0.3297600951682779	0.8185759193179084	0.6608199026861744	T	T	T
0.3438731692277146	0.8510959662845853	0.5722718587616524	T	T	T
0.0002943122515495	0.2730615115567459	0.6000270189934389	T	T	T
0.6623729443064342	0.3973537041255255	0.6350346224230771	T	T	T
0.7390826907945792	0.7479547199186465	0.6082601836444884	T	T	T
0.9235673731107815	0.9256773808407154	0.6254071420140539	T	T	T
0.2731295813346902	0.4908088834765493	0.5997010741590119	T	T	T
0.3947871832123299	0.1651161964615253	0.6381252714058409	T	T	T
0.8520932937312512	0.3281696317147977	0.6607920117125675	T	T	T
0.8059555377628823	0.3432096607971650	0.5722360531792232	T	T	T
0.7270720479300434	0.9997117242295368	0.6001034251180213	T	T	T
0.9391078802179926	0.6617248265045649	0.6353352141169873	T	T	T
0.5131183111081420	0.7393489920213707	0.6082586847584101	T	T	T
0.1511986337364610	0.9222643777729582	0.6254131906930744	T	T	T
0.2317923432044132	0.2751079860281357	0.5993465689501408	T	T	T
0.4463956294907346	0.3893529686754011	0.6385726864376473	T	T	T
0.4827529024756626	0.5263470964231167	0.6024670629612122	T	T	T
0.1865066700724850	0.1364206565815942	0.6301859951590968	T	T	T
0.6003833784013529	0.0649132062124940	0.6576779580960316	T	T	T
0.0628953129908980	0.6051140393210386	0.5763260795195554	T	T	T
0.0764478606384793	0.8388562701647087	0.6673599842567720	T	T	T
0.5858827821313558	0.8214059288495231	0.5668376307991442	T	T	T
0.8217105945016244	0.5763643993197018	0.6596357133970752	T	T	T
0.8356399708134289	0.1018498356681903	0.5773514207556241	T	T	T
0.9918468711476871	0.4823815485085427	0.6027695290951188	T	T	T
0.6761068211351892	0.1850340893773162	0.6302393166797873	T	T	T
0.3411967861111700	0.6023317125441141	0.6580658828107636	T	T	T

0.3319205635016348	0.0630339542042228	0.5762767313865358	T	T	T
0.0853481157265682	0.0755479043987845	0.6672465474150482	T	T	T
0.5930100273491747	0.5857690572803924	0.5668529206008466	T	T	T
0.5999077913901764	0.8274456001753077	0.6593014524140112	T	T	T
0.0630822967513980	0.8339262849135091	0.5773870442213697	T	T	T
0.5271354014410468	0.9903685258711584	0.6024743657722004	T	T	T
0.1422862096523097	0.6738261782673325	0.6308450933382441	T	T	T
0.0626862658020190	0.3348986775444768	0.6567701171264164	T	T	T
0.6056621709067950	0.3320696086915690	0.5761120533812240	T	T	T
0.8395454274811835	0.0847014591943342	0.6672985526759885	T	T	T
0.8225282292278232	0.5924933040385674	0.5669052363072005	T	T	T
0.5753118494850069	0.6004192896302678	0.6589807183404364	T	T	T
0.1023487535596321	0.0623177622395829	0.5773616105336163	T	T	T
0.2177456036712953	0.4059523136930179	0.6745881921719977	T	T	T

**Site 3:**

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038	0.0000000000000000	0.0000000000000000
7.3191758939370519	12.6771845178323304	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	51.0694492725965290

In O Pt

64 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F

0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7606242290461834	0.0143912521826949	0.6443775678562598	T	T	T
0.9043053457580984	0.6549644482612361	0.5919339254411669	T	T	T
0.4264356992700939	0.6793996466942233	0.5839406931735879	T	T	T
0.2385430317310782	0.9853196953782078	0.6506370017173044	T	T	T
0.7474226522865494	0.4879269320445420	0.6505710924875372	T	T	T
0.9302502279002763	0.1778872195707551	0.5838021340096591	T	T	T
0.4022011206079000	0.1545524247354911	0.5918498294415911	T	T	T
0.2700528917589829	0.5103443913732306	0.6416643633978582	T	T	T
0.2010660776122619	0.7728964650050517	0.6406544640535679	T	T	T
0.4393728692844765	0.9045746224746908	0.5923446677572067	T	T	T
0.8940595966474487	0.4266486718487378	0.5835102908391637	T	T	T
0.7803726095826381	0.2362004723097313	0.6478289098343631	T	T	T
0.7698985443493446	0.7409644736122293	0.6501966711898389	T	T	T
0.8913144142957270	0.9310311788274633	0.5837023445113968	T	T	T
0.4426274095672473	0.4021601645007445	0.5920981121137752	T	T	T
0.2198913195115063	0.2660964211855100	0.6406553763167427	T	T	T
0.0138757152822613	0.2249211846975233	0.6447533634180000	T	T	T
0.6550827082641721	0.4400137299876745	0.5924893033079613	T	T	T
0.6791430424151719	0.8933738274836734	0.5835251951917688	T	T	T
0.9770295754374747	0.7837220771296304	0.6478874526931628	T	T	T
0.4987852237338462	0.7682338310693260	0.6514477901954322	T	T	T
0.1773543973815986	0.8936888824182861	0.5834580108145687	T	T	T
0.1558997615420668	0.4420757114796754	0.5920100618639146	T	T	T
0.5140968156508802	0.2194799581493756	0.6400272154874396	T	T	T
0.9958540668903182	0.0053595949419586	0.6509119884728508	T	T	T
0.6660305987151751	0.6664312519315457	0.5875987771664721	T	T	T
0.9935973689335528	0.4966091192087098	0.6454021207586497	T	T	T
0.6678834325829833	0.1645180424891366	0.5875487965769967	T	T	T
0.5014679409916439	0.5122561584117205	0.6463892707957093	T	T	T

0.1646068174872344	0.1670809393223999	0.5880337936375341	T	T	T
0.5113477621492182	0.9927451663073354	0.6453634473917385	T	T	T
0.1666297484820932	0.6660867313474652	0.5873185255744945	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F

0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8147422866679305	0.8552478815978540	0.6605917816241553	T	T	T
0.8508492405684219	0.8051506738170912	0.5723383717884116	T	T	T
0.2695402109677006	0.7272556216256393	0.5993791476819149	T	T	T
0.3974091216555514	0.9398002711444131	0.6353790670345411	T	T	T
0.7487068540204315	0.5120460188489268	0.6083368134910453	T	T	T
0.9264194331412862	0.1512360302379757	0.6254457999920575	T	T	T
0.4951118223548587	0.2305985540485227	0.5974170997467803	T	T	T
0.1727393441713640	0.4381482834158029	0.6395451007558646	T	T	T
0.3507863781972531	0.8390633214190995	0.6742280925621035	T	T	T
0.3437987658748880	0.8499063590979764	0.5725342501024044	T	T	T
0.0006980268843999	0.2730069312784748	0.6002818062457300	T	T	T
0.6623455472946321	0.3975260362674774	0.6356236348954271	T	T	T
0.7394043570068779	0.7472191743926413	0.6082763228239160	T	T	T
0.9224864513389431	0.9275262107350215	0.6250720351399920	T	T	T
0.2729094735338801	0.4954162278302467	0.5984682266261983	T	T	T
0.3895639729191893	0.1714022486454639	0.6392063273548152	T	T	T
0.8547840146757608	0.3271138801309273	0.6607141861849334	T	T	T
0.8053047051054755	0.3439386013226246	0.5724274987674981	T	T	T
0.7258908360249480	0.0002505648781500	0.6000291818012605	T	T	T
0.9417210658796572	0.6616554889135350	0.6350877468595890	T	T	T
0.5121347174835655	0.7400132773098164	0.6090806581582030	T	T	T
0.1568793582748450	0.9271968919224612	0.6257396599907665	T	T	T
0.2320901217758514	0.2729914892874846	0.5979956342868171	T	T	T
0.4397956678828774	0.3885552748459773	0.6374637723684389	T	T	T
0.4804412782049074	0.5279760763541723	0.6039898878598818	T	T	T
0.1869477184813715	0.1386713612965608	0.6311030283981237	T	T	T
0.5984341638476157	0.0662905489058241	0.6575223951366517	T	T	T
0.0617088615067104	0.6049906789020225	0.5761215919491584	T	T	T
0.0650876483190607	0.8457275056984307	0.6667145546057291	T	T	T
0.5852374148671946	0.8214490389181197	0.5670545258968316	T	T	T
0.8305475455751771	0.5738406367864217	0.6593168513295171	T	T	T
0.8353382967586264	0.1022745441796546	0.5773667969189284	T	T	T
-0.0077937275743488	0.4822996255946951	0.6028341771011148	T	T	T
0.6744586109763910	0.1867418375911229	0.6298944473121934	T	T	T
0.3552852390402694	0.5610059658398168	0.6687034189331957	T	T	T
0.3319117699318425	0.0619762769027458	0.5763082384520154	T	T	T
0.0841060733208658	0.0766653010583576	0.6677827135431930	T	T	T

0.5907337297047998	0.5859302714341351	0.5674055222964236	T	T	T
0.6026196497915138	0.8300301643320545	0.6591977889786831	T	T	T
0.0628192788958738	0.8356070408054616	0.5778704874439010	T	T	T
0.5256116201664934	-0.0090313277602134	0.6029103519056516	T	T	T
0.1388353360051820	0.6697542235946209	0.6308647299090469	T	T	T
0.0652867431392246	0.3361601767161692	0.6576335063122623	T	T	T
0.6046774182773359	0.3337626987957794	0.5762711810562156	T	T	T
0.8361070156351517	0.0869994367119551	0.6672334525685166	T	T	T
0.8213601842382625	0.5922833256988781	0.5669828065305472	T	T	T
0.5843707581690943	0.5977864420044371	0.6597308212717028	T	T	T
0.1016111868624830	0.0630812713987502	0.5774322156586439	T	T	T
0.3514316892357050	0.7018896124890082	0.6720320157850006	T	T	T

#### Site 4:

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F

0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7563933808887543	0.0115682381029382	0.6448397559338921	T	T	T
0.9045749553835933	0.6551201225961302	0.5919519606743034	T	T	T
0.4273642048285735	0.6793593721915135	0.5834837199461319	T	T	T
0.2379862304149993	0.9852415470137531	0.6500769344725119	T	T	T
0.7386318636800886	0.4954994549784906	0.6502006057692081	T	T	T
0.9298266328514310	0.1783178020036637	0.5834878289894243	T	T	T
0.4020341943497397	0.1556714765853936	0.5919346804475526	T	T	T
0.2667858318864291	0.5124492007588806	0.6403729803289836	T	T	T
0.2312263332552137	0.7573266094087185	0.6445037534968123	T	T	T
0.4393207744105717	0.9056081163150758	0.5923758780656602	T	T	T
0.8932692528515833	0.4276558825843185	0.5834168552577419	T	T	T
0.7794288170026062	0.2411089860054775	0.6484939742473054	T	T	T
0.7676791073883125	0.7422218280767711	0.6503943147505454	T	T	T
0.8897548301454200	0.9305152367700613	0.5831204229609085	T	T	T
0.4431254408682589	0.4019249821993676	0.5918124729325174	T	T	T
0.2195496727391151	0.2663587945970924	0.6408029619062331	T	T	T
0.0097242140554985	0.2318131970700795	0.6443551700899334	T	T	T
0.6548616787438363	0.4405448357575426	0.5921029591062159	T	T	T
0.6780032684410665	0.8940340994172157	0.5834042919879953	T	T	T
0.9848552503901239	0.7767615934782471	0.6478816712764865	T	T	T
0.4896272958521158	0.7701177115081669	0.6507021026359421	T	T	T
0.1799822375482762	0.8914464439598470	0.5831983939485815	T	T	T
0.1549659636242739	0.4423328916659750	0.5918975041104052	T	T	T
0.5143333452736442	0.2203054600889296	0.6408132928353094	T	T	T
0.0088730606895887	0.9851358745906109	0.6427905595183926	T	T	T
0.6658665154603821	0.6677234989002055	0.5873891776291726	T	T	T
0.9908186534740698	0.4974000820445707	0.6455022128406671	T	T	T
0.6686813640043178	0.1637393032623905	0.5878183503237687	T	T	T
0.4964483531043426	0.5120761549314145	0.6454879817155574	T	T	T
0.1640085559580835	0.1669082207565478	0.5878923934139501	T	T	T
0.5102912863884566	0.9927809792889444	0.6456704206730426	T	T	T



0.1679636523556355	0.6676152349511506	0.5876274809558054	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F

0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8195663421833538	0.8526468016081329	0.6609116190578546	T	T	T
0.8501594854331165	0.8059116067722477	0.5724555672630210	T	T	T
0.2733797309526916	0.7272268058412215	0.6005009912076035	T	T	T
0.3967681482823708	0.9427246071443268	0.6360106048759246	T	T	T
0.7471904566867026	0.5138948233343570	0.6082747661564435	T	T	T
0.9263774705972676	0.1488301116307677	0.6254573310470549	T	T	T
0.4961777281065141	0.2313754947284825	0.5983072680578350	T	T	T
0.1713307353839758	0.4386730029092912	0.6391627551341715	T	T	T
0.3282780086316355	0.8195593776343524	0.6617425607153057	T	T	T
0.3443472818162924	0.8506702604614217	0.5723596066308314	T	T	T
0.9995690609865141	0.2734190595548830	0.6004341686923812	T	T	T
0.6598857001769926	0.3988909195199309	0.6354626552317770	T	T	T
0.7394567140262590	0.7482063307769662	0.6083516740272998	T	T	T
0.9147092215190394	0.9271033065813737	0.6254612894857250	T	T	T
0.2742352869729051	0.4932359017288470	0.5977481658110122	T	T	T
0.3893341111307309	0.1720387355216100	0.6394674120165167	T	T	T
0.8515143818209190	0.3351281579260299	0.6596730849957753	T	T	T
0.8055603776036474	0.3439808996252433	0.5725301041729983	T	T	T
0.7249188730794225	0.0001844258209093	0.6002835477092916	T	T	T
0.9407365365222952	0.6610878737973045	0.6354417873739093	T	T	T
0.5117265168878335	0.7407454970590309	0.6086505224560143	T	T	T
0.1603528222597531	0.9240451981498383	0.6252357701219248	T	T	T
0.2312234939904254	0.2724207449149839	0.5982200368803430	T	T	T
0.4396185441766363	0.3891519627638360	0.6394073441656061	T	T	T
0.4816601978630282	0.5263635771031914	0.6029402445820345	T	T	T
0.1827194071215255	0.1387114087232273	0.6313104507796952	T	T	T
0.5964749044152264	0.0669853866001629	0.6585153679742847	T	T	T
0.0619808959394964	0.6056536762950596	0.5762726695411395	T	T	T
0.0792691749935501	0.8358415303190754	0.6648314244397882	T	T	T
0.5844850629611436	0.8228440508135698	0.5671357945030855	T	T	T
0.8263709602920541	0.5759655385615375	0.6595368791358873	T	T	T
0.8359076500420977	0.1012566643743950	0.5777073831445377	T	T	T
0.9911659161743896	0.4825776098372078	0.6029674146751755	T	T	T
0.6812278644221517	0.1804080269573338	0.6311799021111665	T	T	T
0.3364813828927590	0.5967662230820541	0.6581714008682072	T	T	T
0.3316035110001045	0.0624504898414846	0.5765725326134853	T	T	T
0.0856910755665069	0.0913975259034881	0.6719613154584697	T	T	T
0.5919746103877054	0.5862231749240939	0.5671707238876769	T	T	T
0.5989801450166657	0.8283236503309467	0.6593890870673252	T	T	T

0.0621104679117975	0.8373804907359800	0.5782849194042001	T	T	T
0.5252743072454753	0.9922881137630374	0.6031770201301466	T	T	T
0.1403892536914967	0.6722791487364781	0.6299359641892183	T	T	T
0.0652816388573639	0.3373310426194514	0.6579651225948143	T	T	T
0.6063197566732379	0.3314889945686997	0.5765361522031094	T	T	T
0.8141418735496013	0.1096594735780071	0.6754595367720053	T	T	T
0.8212146322013391	0.5928382386898408	0.5670157127537556	T	T	T
0.5719078884666278	0.6011299984131397	0.6593645677840143	T	T	T
0.1011560633802245	0.0625063393421002	0.5777304488846446	T	T	T
0.9522570804943663	0.0953150661392339	0.6841560655390169	T	T	T

**Site 5:**

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F

0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7548813534139319	0.0043404427710665	0.6432203374446075	T	T	T
0.9037636896052454	0.6529870001301680	0.5919485777632929	T	T	T
0.4249967503010847	0.6785831089256085	0.5834335768464290	T	T	T
0.2301522818292282	0.9820960929826111	0.6483307057730474	T	T	T
0.7348428752749392	0.4937974921184552	0.6502031963811044	T	T	T
0.9282614995214670	0.1753967742520507	0.5848044448562900	T	T	T
0.4004472331615478	0.1539729376927794	0.5920834321550688	T	T	T
0.2637557384743184	0.5110939872432978	0.6403420684130109	T	T	T
0.2234719821304752	0.7585215710855779	0.6441668456422706	T	T	T
0.4374427070161554	0.9037139733456935	0.5918632693205025	T	T	T
0.8910632992524232	0.4247945669595583	0.5835568767713398	T	T	T
0.7695513472586853	0.2461682142749854	0.6499405428464754	T	T	T
0.7651639638493339	0.7375103152391189	0.6500611478172516	T	T	T
0.8910701916189148	0.9285142906280699	0.5836683686757520	T	T	T
0.4413721610191715	0.4005091795372228	0.5920996806299974	T	T	T
0.2170927273830355	0.2638521507569896	0.6405429242506255	T	T	T
0.0077358609629602	0.2253245121605596	0.6451460487676178	T	T	T
0.6521572277265174	0.4401852402016516	0.5920084606119316	T	T	T
0.6775116098357347	0.8921093669292564	0.5834271196267992	T	T	T
0.9809607656831842	0.7782378098543433	0.6477338878963955	T	T	T
0.4843817207995504	0.7690229169900699	0.6500613344215010	T	T	T
0.1758355515613277	0.8909555998245355	0.5837075488806350	T	T	T
0.1532030013264168	0.4413216198527301	0.5919591145931558	T	T	T
0.5151732740698355	0.2170050934375167	0.6407392828190310	T	T	T
0.9997924994911418	0.9955536617824046	0.6498270533156156	T	T	T
0.6647858253180906	0.6658720437602426	0.5871751313976141	T	T	T
0.9886010476856333	0.4935654158612175	0.6452018291142265	T	T	T
0.6681470240655941	0.1638924200019163	0.5878057290942954	T	T	T
0.4916595530104081	0.5128059627427801	0.6455400410563688	T	T	T
0.1624582242807316	0.1657987207829283	0.5878849863633417	T	T	T
0.5055461611065626	0.9905927448001154	0.6454185519343258	T	T	T
0.1668147384699654	0.6664580034113097	0.5875645795414947	T	T	T

0.8159583373333348 0.8601013333333327 0.4862116819395084 F F F  
0.3946230123333336 0.9387660083333316 0.4585959608606061 F F F  
0.9187303516666674 0.1545573616666687 0.4501329301675625 F F F  
0.1692716669999967 0.4334446800000009 0.4604640541843779 F F F  
0.3239403293333325 0.8159583373333348 0.4862116819395084 F F F  
0.6666109793333348 0.3946230123333336 0.4585959608606061 F F F  
0.9267122866666639 0.9187303516666674 0.4501329301675625 F F F  
0.3972836530000023 0.1692716669999967 0.4604640541843779 F F F  
0.8601013333333327 0.3239403293333325 0.4862116819395084 F F F  
0.9387660083333316 0.6666109793333348 0.4585959608606061 F F F  
0.1545573616666687 0.9267122866666639 0.4501329301675625 F F F  
0.4334446800000009 0.3972836530000023 0.4604640541843779 F F F  
0.1840416783333296 0.1398986823333317 0.4552789502821071 F F F  
0.6053770033333308 0.0612340073333328 0.4828946713610023 F F F  
0.0812696673333306 0.8454426573333365 0.4913577008838672 F F F  
0.8307283486666677 0.5665553356666635 0.4810265780372305 F F F  
0.6760596393333316 0.1840416783333367 0.4552789502821071 F F F  
0.3333889893333364 0.6053770033333308 0.4828946713610023 F F F  
0.0732876753333329 0.0812696673333306 0.4913577008838672 F F F  
0.6027163156666688 0.8307283486666677 0.4810265780372305 F F F  
0.1398986823333317 0.6760596393333316 0.4552789502821071 F F F  
0.0612340073333328 0.3333889893333364 0.4828946713610023 F F F  
0.8454426573333365 0.0732876753333329 0.4913577008838672 F F F  
0.5665553356666635 0.6027163156666688 0.4810265780372305 F F F  
0.5157927795144346 0.4732687373369373 0.5137680585633078 F F F  
0.9389780411721915 0.3945739458359014 0.5412288865474011 F F F  
0.4138055884135099 0.1792879430058036 0.5501013560831254 F F F  
0.1643402231079705 0.8991522013241848 0.5396430093322451 F F F  
0.0109384831486281 0.5157927795144346 0.5137680585633078 F F F  
0.6664480129919070 0.9389780411721915 0.5412288865474011 F F F  
0.4069064685806794 0.4138055884135099 0.5501013560831254 F F F  
0.9365075755678447 0.1643402231079705 0.5396430093322451 F F F  
0.4732687373369373 0.0109384831486281 0.5137680585633078 F F F  
0.3945739458359014 0.6664480129919070 0.5412288865474011 F F F  
0.1792879430058036 0.4069064685806794 0.5501013560831254 F F F  
0.8991522013241848 0.9365075755678447 0.5396430093322451 F F F  
0.1502078384511734 0.1932397001298156 0.5448734685138632 F F F  
0.7272745789267816 0.2725057257219632 0.5171331615441943 F F F  
0.2523256400471894 0.4873897408432910 0.5086482917388153 F F F  
0.5022127006463535 0.7673910184547594 0.5188430143373637 F F F  
0.6565524614190181 0.1502078384511734 0.5448734685138632 F F F  
0.0002196953512481 0.7272745789267816 0.5171331615441943 F F F  
0.2602846191095196 0.2523256400471894 0.5086482917388153 F F F  
0.7303962808988871 0.5022127006463535 0.5188430143373637 F F F

0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8148690391358824	0.8474079515739916	0.6601247503993832	T	T	T
0.8495219717239789	0.8039624195597754	0.5722689786056291	T	T	T
0.2720902617331413	0.7257118259517035	0.6000350133814213	T	T	T
0.3914328671461922	0.9409025849816377	0.6354986503792884	T	T	T
0.7441258828498060	0.5127537059186053	0.6081886653326444	T	T	T
0.9157658719794884	0.1509199704728564	0.6275902138560756	T	T	T
0.4944794041794832	0.2298152309235077	0.5980787943860241	T	T	T
0.1676420355405015	0.4373436713330645	0.6388674511517776	T	T	T
0.3242295161444220	0.8161538183972558	0.6606558887924655	T	T	T
0.3412331935250068	0.8502623185691472	0.5722204456263167	T	T	T
0.9970870419238836	0.2700213772487363	0.6006724682108550	T	T	T
0.6536758956366107	0.4006869178498572	0.6349757447587795	T	T	T
0.7381502205302125	0.7460680786121149	0.6080018474183960	T	T	T
0.9175500395271177	0.9252763780251775	0.6255889616745784	T	T	T
0.2718719535879436	0.4924876082498215	0.5977478755053466	T	T	T
0.3871554815597644	0.1702313720544386	0.6391654029844057	T	T	T
0.8496938940446482	0.3355032622855805	0.6598620654525118	T	T	T
0.8034759491692478	0.3419335452673659	0.5723110991470775	T	T	T
0.7240130565623701	0.9989740026910089	0.5994922230263362	T	T	T
0.9413331642672202	0.6567357771900593	0.6351487322157956	T	T	T
0.5103872424747085	0.7392474276429778	0.6080152821108888	T	T	T
0.1478104863284961	0.9210210314835618	0.6251571113888972	T	T	T
0.2295862388700744	0.2715337311748126	0.5978389418844260	T	T	T
0.4372905691940568	0.3871170320331509	0.6392467229772769	T	T	T
0.4782846242047494	0.5261142249201330	0.6028725118378485	T	T	T
0.1824476835508325	0.1376623695708779	0.6305786295706091	T	T	T
0.5942027603475031	0.0625092148583014	0.6578155650445275	T	T	T
0.0607183676167347	0.6041280146172500	0.5760897985481527	T	T	T
0.0743195333197803	0.8357673252559507	0.6664291458125872	T	T	T
0.5841989226506877	0.8211330438887566	0.5667658643384004	T	T	T
0.8246467514830520	0.5722375753740684	0.6592726791141701	T	T	T
0.8355498217014099	0.0999412774228825	0.5774576470713295	T	T	T
0.9895292993905601	0.4794093433594410	0.6026065770244303	T	T	T
0.6796517121934964	0.1774734505337196	0.6306552760894252	T	T	T
0.3316672254973149	0.5961031516815882	0.6581686296123523	T	T	T
0.3307100317646946	0.0611247351513952	0.5760541928242321	T	T	T
0.0787585259283481	0.0754727041191947	0.6672876272401839	T	T	T
0.5904534243602001	0.5853003233878731	0.5670056030502899	T	T	T
0.5950331556528298	0.8256900196258932	0.6584335183919849	T	T	T
0.0613470719425663	0.8342551522431355	0.5774195618368059	T	T	T

0.5235796945872608	0.9894821561185760	0.6029566564640066	T	T	T
0.1375494140634013	0.6727440534125252	0.6298315813271381	T	T	T
0.0636225289991938	0.3336929948437309	0.6582678981509310	T	T	T
0.6044008354694409	0.3316652027662774	0.5763724500958612	T	T	T
0.8480029992033410	0.0413444136605717	0.6720674080565324	T	T	T
0.8201178371245283	0.5907833111865888	0.5669347317757110	T	T	T
0.5681607393263155	0.6007273428705558	0.6594635868329434	T	T	T
0.0996817546366363	0.0617774058972635	0.5776566761251497	T	T	T
0.7706969139106532	0.1597900296997151	0.6940054268039192	T	T	T

**Site 6:**

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038	0.0000000000000000	0.0000000000000000
7.3191758939370519	12.6771845178323304	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	51.0694492725965290

In O Pt

64 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F

0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7615850062135494	0.0149618360471623	0.6444639767016260	T	T	T
0.9047937241040357	0.6556881996740903	0.5927756319740122	T	T	T
0.4267576380935799	0.6797803987271801	0.5835251416632257	T	T	T
0.2344803250393560	0.9841682783804594	0.6477312702421542	T	T	T
0.7325725073200977	0.4832033650007094	0.6499055579650096	T	T	T
0.9303295170292473	0.1774501290573145	0.5838243197298111	T	T	T
0.4013494577211926	0.1552135310790576	0.5918917943254107	T	T	T
0.2655508786142043	0.5154977387701571	0.6404388402047261	T	T	T
0.2246325496852836	0.7631030554361112	0.6447018126186624	T	T	T
0.4398774677999098	0.9050589596628040	0.5920584756747911	T	T	T
0.8942009790467876	0.4275267108252982	0.5841382662994004	T	T	T
0.7811219447707584	0.2330686445133961	0.6478102152799934	T	T	T
0.7674907368380656	0.7508126552325425	0.6516546640062256	T	T	T
0.8918247037562651	0.9307218932417907	0.5838263688062443	T	T	T
0.4417271175699827	0.4018753141060017	0.5918895835806643	T	T	T
0.2195907330176285	0.2644745156771248	0.6403065937839972	T	T	T
0.0119342524444240	0.2262129947672135	0.6445903940112685	T	T	T
0.6540621301931429	0.4396898443840739	0.5915587394512485	T	T	T
0.6797678219362531	0.8928535115477857	0.5837114120111704	T	T	T
0.9834011003109548	0.7835895550068752	0.6477541258951395	T	T	T
0.4888788755380263	0.7701711460600889	0.6502962381402732	T	T	T
0.1772809154781896	0.8920452586379655	0.5838603880902815	T	T	T
0.1540430654074656	0.4432542747734910	0.5919212646815152	T	T	T
0.5132254089211390	0.2199229164832440	0.6403586989221312	T	T	T
0.9999550599696003	0.0006915760369731	0.6505747669376735	T	T	T
0.6672130700435662	0.6666262357115263	0.5880632267901723	T	T	T
0.0024514558533559	0.4991002504839134	0.6472206613259620	T	T	T
0.6675954277268481	0.1638844136609962	0.5876356594402595	T	T	T
0.4926675550482305	0.5125354002696142	0.6450602058770792	T	T	T
0.1637417412704625	0.1676348783985350	0.5876175006502898	T	T	T
0.5104264907332476	0.9927170937819839	0.6452654090379891	T	T	T
0.1672043970342358	0.6684799044466142	0.5877303835186105	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F



0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F

0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8190739363105481	0.8593220492576950	0.6611141687060055	T	T	T
0.8505472608702592	0.8051119387826664	0.5723447866821395	T	T	T
0.2733172810009271	0.7266859896528757	0.6001455449796614	T	T	T
0.3965747356685756	0.9423205376942688	0.6351728128537479	T	T	T
0.7457277238612872	0.5116915799086907	0.6085271319865833	T	T	T
0.9262984317117757	0.1509925973206647	0.6253128895754266	T	T	T
0.4935868318058487	0.2322531909279004	0.5977500401089519	T	T	T
0.1750887846978847	0.4371404634917545	0.6395412903659028	T	T	T
0.3280172474291600	0.8196528890639544	0.6606483025521707	T	T	T
0.3439014809013523	0.8509719236013842	0.5722461052322562	T	T	T
0.9997709841070507	0.2734170289684467	0.6001151904798527	T	T	T
0.6563206867698481	0.3943918882036302	0.6349607847924439	T	T	T
0.7389127335978206	0.7486228279460749	0.6093636853122343	T	T	T
0.9230703194459400	0.9282465156873089	0.6251295552033632	T	T	T
0.2725504791883993	0.4948260660377027	0.5978750116437616	T	T	T
0.3891357312678360	0.1716115596966331	0.6389694808889158	T	T	T
0.8502951459156849	0.3269316744495190	0.6608730881004173	T	T	T
0.8055376850270506	0.3442571265664709	0.5723267634354741	T	T	T
0.7263354793222498	0.0000997901365748	0.6000757577484012	T	T	T
0.9402037382179328	0.6656625496245544	0.6348565566031253	T	T	T
0.5124458742911349	0.7397559093895789	0.6083539065953261	T	T	T
0.1504757523629963	0.9230839591285206	0.6252984400346715	T	T	T
0.2310803839190652	0.2740717026879193	0.5977430213569054	T	T	T
0.4374707199454470	0.3898345815840154	0.6391883997712758	T	T	T
0.4811604870796335	0.5258576242501242	0.6025232505676452	T	T	T
0.1856133540079820	0.1385259359466662	0.6298741040449112	T	T	T
0.5980930593337387	0.0658818548505903	0.6574847453480959	T	T	T
0.0617958217576045	0.6055243887659423	0.5761106327170272	T	T	T
0.0762656143452452	0.8399768233399801	0.6672358242575607	T	T	T
0.5866183755969455	0.8209051572953227	0.5670258375932620	T	T	T
0.8142098437378306	0.5723202759833423	0.6548112717671595	T	T	T
0.8346915161997542	0.1025394663457881	0.5773009003823271	T	T	T
0.9918888984443242	0.4832587406035647	0.6043678464474622	T	T	T
0.6737778502219288	0.1861318152075727	0.6301292302066784	T	T	T
0.3338058669320519	0.5999320054606365	0.6581120859353656	T	T	T
0.3320701747706430	0.0622098437029333	0.5761050752813724	T	T	T
0.0842752925407916	0.0773573652224461	0.6670201900972932	T	T	T
0.5923021746434627	0.5863532362546324	0.5669808781373619	T	T	T
0.5970758995545350	0.8296591593493822	0.6594601657281910	T	T	T
0.0625030204504176	0.8353881971198759	0.5773103454963924	T	T	T
0.5257798597085845	0.9918651614976075	0.6026717726627250	T	T	T
0.1390551529455520	0.6757787325857435	0.6302234606510180	T	T	T

0.0661446611007650	0.3349231538994132	0.6573835419700962	T	T	T
0.6048684284474644	0.3320532630107983	0.5761133644585463	T	T	T
0.8389056588642063	0.0847590361893638	0.6673535215608351	T	T	T
0.8227205266030378	0.5914963633922585	0.5674743081014221	T	T	T
0.5687849285799477	0.5998060979261944	0.6588969443246562	T	T	T
0.1018288596530341	0.0625545422254275	0.5773035534486498	T	T	T
0.8691953071977119	0.5896086244572716	0.6879971208603054	T	T	T

**Pt-SA on Indium Tin Oxide:**

**Site 1:**

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O Pt

56 8 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F

0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7611984804330393	0.0175420350511247	0.6416276341148018	T	T	T
0.9045926468703656	0.6531858417516573	0.5900648767518644	T	T	T
0.4254727590470883	0.6788162506643710	0.5821583247327800	T	T	T
0.9306727618395273	0.1769295991555655	0.5818471777645007	T	T	T
0.4032817626027998	0.1530152161721172	0.5907023368268079	T	T	T
0.2206002544531016	0.7588122353312708	0.6406871554271003	T	T	T
0.4394109122168212	0.9048256567445863	0.5908853483841535	T	T	T
0.8939011505860522	0.4256072572424280	0.5817793984705174	T	T	T
0.7814255484074937	0.2366382907302070	0.6449756558222671	T	T	T
0.8919639809406202	0.9305686354572238	0.5816638897897596	T	T	T
0.4408352174404654	0.4008389912122422	0.5904345804122350	T	T	T
0.2224660222844812	0.2625261798454605	0.6390024539465430	T	T	T
0.0141991532061299	0.2254761076856063	0.6416511763862599	T	T	T
0.6518820100297996	0.4400771468478524	0.5895858294063669	T	T	T
0.6787212276761428	0.8944606433254294	0.5822882818885451	T	T	T
0.1765307340285894	0.8910225630979709	0.5817525364342008	T	T	T
0.1549416524057725	0.4401317486515066	0.5905690164179185	T	T	T
0.5139484206403953	0.2215654247792373	0.6387365866234765	T	T	T
0.6651405491168532	0.6676809252940320	0.5865401988107750	T	T	T
0.9928761539142350	0.4892910248736570	0.6432109313586173	T	T	T
0.6679976912092014	0.1642538030739308	0.5861019170382337	T	T	T
0.4910034119374239	0.5109405986703259	0.6429710336484483	T	T	T
0.1653830441892189	0.1659233937655484	0.5861841968800187	T	T	T
0.5115026376662966	0.9955033510137381	0.6448493382021181	T	T	T
0.1669129942215407	0.6655455865163464	0.5858542914859957	T	T	T
0.2338891096379339	0.9822308076965939	0.6446347192285979	T	T	T
0.2633720009229250	0.5110839323450083	0.6389676699485266	T	T	T
0.9848195270085758	0.7853031486085801	0.6443374505328975	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7367270375064264	0.4906145166098920	0.6462542725499788	T	T	T
0.7778047864446609	0.7425989016370169	0.6480444852129605	T	T	T
0.4761019062948967	0.7713897234376581	0.6494052217710857	T	T	T
0.9997225536075857	0.0018235772297687	0.6458420959164204	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F

0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F

0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8249047787704471	0.8568373027480310	0.6548863378517306	T	T	T
0.8501143323690631	0.8049447881490973	0.5712326221617757	T	T	T
0.2701006248610279	0.7268959706063930	0.5981282156987443	T	T	T
0.3971676058481837	0.9363934101995729	0.6328612657311694	T	T	T
0.7444974645042175	0.5117078098226170	0.6069308053089629	T	T	T
0.9288781218602270	0.1479232413412155	0.6232186713159368	T	T	T
0.4957616206541877	0.2303060092988085	0.5964026005428202	T	T	T
0.1679199374020021	0.4373441938855548	0.6370323772224147	T	T	T
0.3230952349499308	0.8131456692455604	0.6534598906503163	T	T	T
0.3441348009519607	0.8489705957709403	0.5711929654103965	T	T	T
0.0002487343903851	0.2716613542538590	0.5983326440731931	T	T	T
0.6599851590009215	0.4012485973947300	0.6335641068087895	T	T	T
0.7425122575985689	0.7468926286577132	0.6076847122229552	T	T	T
0.9266184204573810	0.9345651801509244	0.6224190907033609	T	T	T
0.2713708932874881	0.4938803775776730	0.5966207302455261	T	T	T
0.3920192344197436	0.1681284871204744	0.6372035218341299	T	T	T
0.8492348034977184	0.3360625012957686	0.6555877991512300	T	T	T
0.8051034680771375	0.3434600721609121	0.5711300570589566	T	T	T
0.7288298543968421	0.9998462415516566	0.5984549676927131	T	T	T
0.9366944932649137	0.6599571297822819	0.6352556899172748	T	T	T
0.5105918660682532	0.7392169844617283	0.6088593722639718	T	T	T
0.1417782468740768	0.9268392276229437	0.6226290721491596	T	T	T
0.2324187795663473	0.2707116289012091	0.5967206612109159	T	T	T
0.4374523944589198	0.3901764482711187	0.6369941334088310	T	T	T
0.4795169164160136	0.5253865515474686	0.6008494745895324	T	T	T
0.1859871902835041	0.1364608444577718	0.6283556060878509	T	T	T
0.6018675538219329	0.0710716512206094	0.6557736415966242	T	T	T
0.0614065273785541	0.6034447151393921	0.5747450149720067	T	T	T
0.0719742559414482	0.8512688240864008	0.6629255307037325	T	T	T
0.5858129443328937	0.8208914159839907	0.5665399985185112	T	T	T
0.8257128604949635	0.5623166259099666	0.6533722980912545	T	T	T
0.8354447991031435	0.1019044713352556	0.5756386322220182	T	T	T
0.9906952847181915	0.4815500371963291	0.6011097721087685	T	T	T
0.6765087851438614	0.1886036896980035	0.6280708045123338	T	T	T
0.3297662573292822	0.5994238124465424	0.6550832452674611	T	T	T
0.3328480816100371	0.0609808929662028	0.5746565121565513	T	T	T
0.0785765398453708	0.0722655669109513	0.6630141678787055	T	T	T
0.5905989421872756	0.5876205617585009	0.5661927228729792	T	T	T
0.0622990426103352	0.8331987793101211	0.5756175566839078	T	T	T
0.5267918766299222	0.9903981969414859	0.6021638432716998	T	T	T
0.1347937726503504	0.6744779949852171	0.6280932865683907	T	T	T
0.0685966505398167	0.3293883122779915	0.6560465101744921	T	T	T

0.6045069947433940	0.3314233290311989	0.5746227025520737	T	T	T
0.8501928476093985	0.0814572677733328	0.6631766482625880	T	T	T
0.8197960396171614	0.5910367982509729	0.5661750009883828	T	T	T
0.5715989598298291	0.5999703181326587	0.6543191315250310	T	T	T
0.1018322674568362	0.0617436352503468	0.5756536955373193	T	T	T
0.4715060924731556	0.8375101178742184	0.6859045937711398	T	T	T
0.6048995660202904	0.8187187254919769	0.6715170434149594	T	T	T

**Site 2:**

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.1539898045825509 0.0117348602194267 44.4205337057521348

In Sn O Pt

56 8 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7601299999999966	0.0111199999999982	0.3212997282865118	F	F	F
0.2434165335433676	0.9854015590178022	0.3303952552037757	F	F	F
0.7751763166389409	0.2373103908289238	0.3303952552037757	F	F	F
0.7758184051208019	0.7360378284433793	0.3303952583554732	F	F	F
0.0149432086993002	0.2262095211845576	0.3212997282865118	F	F	F
0.9921246538137325	0.7693967045361916	0.3303952552037757	F	F	F
0.4928005224042380	0.7693966968225325	0.3303952583554732	F	F	F
0.0028580599244989	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.5041760321789965	0.9965305487398979	0.3258474991741451	F	F	F
0.5754695993874179	0.3201690636836290	0.3988024242875312	F	F	F
0.1000335765341589	0.3427603350605963	0.3893470124551968	F	F	F
0.5996577811357540	0.8418219209004363	0.3888098595214231	F	F	F
0.0767109653050468	0.8183100051456691	0.3986376552181525	F	F	F
0.1114318610020959	0.5689322078448171	0.3988024242875312	F	F	F
0.5634797054024645	0.0941582901478952	0.3893470124551968	F	F	F
0.5641186345741858	0.5925506639960076	0.3888098595214231	F	F	F
0.1114494334935046	0.0701311676366885	0.3986376552181525	F	F	F
0.3261319662881945	0.1051291103740297	0.3988024242875312	F	F	F
0.3492093643680292	0.5573702775606932	0.3893470124551968	F	F	F
0.8488610604088223	0.5573745329822160	0.3888098595214231	F	F	F
0.8248676130051109	0.1057902286404513	0.3986376552181525	F	F	F
0.3383792532104977	0.8302004322606820	0.3937513645347082	F	F	F
0.8367796411124147	0.3315350310755605	0.3937513645347082	F	F	F
0.7420985760889067	0.4866741287148670	0.3303952583554732	F	F	F

0.3376277839809418	0.3314195471817456	0.3942364325472383	F	F	F
0.8376409987888778	0.8299810709125808	0.3937513645347082	F	F	F
0.7637513676131474	0.0148511635237118	0.5259905198277064	T	T	T
0.9111480304762761	0.6506501199335544	0.4650234854774227	T	T	T
0.4300329557846220	0.6783790224960593	0.4559298065588814	T	T	T
0.2410046481891691	0.9816048045205055	0.5291346149982301	T	T	T
0.9368608002478553	0.1736273676977309	0.4563925769466421	T	T	T
0.4076414295389968	0.1531242110959204	0.4666981832060346	T	T	T
0.2775791912466163	0.4980081147846802	0.5258520983005641	T	T	T
0.2299626682785220	0.7565595489282367	0.5259042652198660	T	T	T
0.4458910986494086	0.9041835510554488	0.4649825204828374	T	T	T
0.8991408307623753	0.4227963861783308	0.4559251926413111	T	T	T
0.7865748552001092	0.2328317484262039	0.5289748000266208	T	T	T
0.8970792640860737	0.9294672939553786	0.4562967949222128	T	T	T
0.4470337991283441	0.4001253004112032	0.4666240206870231	T	T	T
0.2336687372489482	0.2695750819753069	0.5259794301493670	T	T	T
0.0228448580630690	0.2220612641980769	0.5260084867779922	T	T	T
0.6581617871189118	0.4383055510761068	0.4647761527723817	T	T	T
0.6859230841154369	0.8916219882113638	0.4559599816695019	T	T	T
0.9892331913817519	0.7791273105022498	0.5291808980025628	T	T	T
0.1811944803094002	0.8899432363764535	0.4563452986202420	T	T	T
0.1602502099188491	0.4400949153812693	0.4666826837489182	T	T	T
0.5055327370519270	0.2257665830588169	0.5260305970645045	T	T	T
0.6715334584218342	0.6645157313320091	0.4600347801492877	T	T	T
0.9965016744335058	0.4904077028359133	0.5264257327986605	T	T	T
0.6694849348496771	0.1638402499359515	0.4623006082971506	T	T	T
0.4986757772226195	0.5143241199408293	0.5260441773341543	T	T	T
0.1713292302797789	0.1672875340035984	0.4622708856265599	T	T	T
0.5223590720510077	0.9883941448526996	0.5263355106595464	T	T	T
0.1737992699284807	0.6626297736887208	0.4622139492366372	T	T	T
0.2318915289287986	0.7582958518869418	0.3212997282865118	F	F	F
0.5035339362280098	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.2649692708826521	0.5089321445234489	0.3212997314382093	F	F	F
0.0035676858993980	0.9990756731962591	0.3258474928707500	F	F	F
0.7453872396211814	0.4862959045343759	0.5310425952066701	T	T	T
0.7776532904029811	0.7368916244996829	0.5312955479715168	T	T	T
0.4947378442169624	0.7694260563498657	0.5312326589347106	T	T	T
0.0057686850067633	0.9975552192654277	0.5313039929816227	T	T	T
0.2312494253227371	0.2595683989238466	0.3212997314382093	F	F	F
0.5142673705564675	0.2262095135495770	0.3212997314382093	F	F	F
0.8197245306682390	0.8569508763088862	0.3438201600901110	F	F	F
0.3987081608861587	0.9354815458449366	0.3117293471016254	F	F	F
0.9209922397635992	0.1532890848265680	0.3018948934479724	F	F	F
0.1730362783713417	0.4314418369345745	0.3139001625321427	F	F	F



0.3283148989230753 0.8129202287039874 0.3438201600901110 F F F  
0.6696296955644030 0.3927234531479655 0.3117293471016254 F F F  
0.9299447303656834 0.9155171710171928 0.3018948934479724 F F F  
0.4004008100581657 0.1679411731758620 0.3139001625321427 F F F  
0.8631193247769602 0.3221544605376110 0.3438201600901110 F F F  
0.9417661356484075 0.6640191810841145 0.3117293471016254 F F F  
0.1588437830399343 0.9234787908990896 0.3018948934479724 F F F  
0.4368057691204541 0.3953728437525825 0.3139001625321427 F F F  
0.1873433418511681 0.1386553765605854 0.3078748193479939 F F F  
0.6083597115729162 0.0601247068673771 0.3399656321113582 F F F  
0.0860756361414658 0.8423171707979833 0.3498000846394120 F F F  
0.8340315940587928 0.5641644156990608 0.3377948166808480 F F F  
0.6787529268564683 0.1826860237720780 0.3078748193479939 F F F  
0.3374381297247666 0.6028827994856698 0.3399656321113582 F F F  
0.0771230884463421 0.0800890850007647 0.3498000846394120 F F F  
0.6066670156113929 0.8276650793790878 0.3377948166808480 F F F  
0.1439485478357412 0.6734517452805591 0.3078748193479939 F F F  
0.0653017366889372 0.3315870247342687 0.3399656321113582 F F F  
0.8482240925665394 0.0721274080750689 0.3498000846394120 F F F  
0.5702621035290605 0.6002333619871152 0.3377948166808480 F F F  
0.5198187726736379 0.4710367487921232 0.3758420117279684 F F F  
0.9426805682623609 0.3924764106726286 0.4077528311564294 F F F  
0.4180544851025232 0.1777170637495047 0.4180630728800807 F F F  
0.1697176184977991 0.8957742608203105 0.4059099647347324 F F F  
0.0157015007558172 0.5134525626218860 0.3758420117279684 F F F  
0.6712180398470551 0.9354949379856805 0.4077528311564294 F F F  
0.4114658565705795 0.4116378360625106 0.4180630728800807 F F F  
0.9398975868734993 0.1628324598200166 0.4059099647347324 F F F  
0.4767584900125641 0.0098831757007858 0.3758420117279684 F F F  
0.3993614858472370 0.6636585286003154 0.4077528311564294 F F F  
0.1841461447858563 0.4047562752544636 0.4180630728800807 F F F  
0.9035843176360459 0.9330345621793654 0.4059099647347324 F F F  
0.1547644004390776 0.1916458452052581 0.4119880130487985 F F F  
0.7307997352263129 0.2707766336215016 0.3797524253477320 F F F  
0.2566607160774623 0.4851340867038942 0.3698925933407295 F F F  
0.5066993712809946 0.7643982900759099 0.3817393573504972 F F F  
0.6603693326687292 0.1487235043712474 0.4119880130487985 F F F  
0.0053116273190454 0.7243880503595861 0.3797524253477320 F F F  
0.2643070694647278 0.2506682497746482 0.3698925933407295 F F F  
0.7342339744034376 0.4998948800842840 0.3817393573504972 F F F  
0.1983330781461632 0.6537794249032487 0.4119880130487985 F F F  
0.2762959286617175 0.9991836010246260 0.3797524253477320 F F F  
0.4911154325054667 0.2586069723533484 0.3698925933407295 F F F  
0.7714717372890760 0.7274977081085865 0.3817393573504972 F F F

0.8210921756318260	0.8493932339754635	0.5418306132704751	T	T	T
0.8560189517102365	0.8029433443977986	0.4436579131963201	T	T	T
0.2758085611088263	0.7269273259298049	0.4753617233605407	T	T	T
0.4087109618290373	0.9319878388275021	0.5158784332215970	T	T	T
0.7520509776745365	0.5105243275379894	0.4852323122667075	T	T	T
0.9363859421630731	0.1421401128741861	0.5045157142626663	T	T	T
0.4998031229997610	0.2297002689699520	0.4746527747309334	T	T	T
0.1583228867427434	0.4494571107460004	0.5165855499204943	T	T	T
0.3388748806416379	0.8136842698265457	0.5418486422468531	T	T	T
0.3487755941189180	0.8487429461216545	0.4434347509955168	T	T	T
0.0050109251920273	0.2685998367403174	0.4754958688680843	T	T	T
0.6683411890414553	0.4009211581425748	0.5156771053253958	T	T	T
0.7457869610946661	0.7440127333216494	0.4855513897878352	T	T	T
0.9298640919202448	0.9281372483620050	0.5044881841935664	T	T	T
0.2781027819992698	0.4930984017099603	0.4745939235867862	T	T	T
0.4010510167316327	0.1500584701210880	0.5165936813891869	T	T	T
0.8570825970837109	0.3304787266896589	0.5417338543858811	T	T	T
0.8105724838204246	0.3406927364323437	0.4435868071055732	T	T	T
0.7345464613180069	0.9976837503498241	0.4755045658387519	T	T	T
0.9396711163399768	0.6605016410020756	0.5161125976951642	T	T	T
0.5178883153340963	0.7379335662246229	0.4855093884753244	T	T	T
0.1503245236627364	0.9224399362352277	0.5044781690059246	T	T	T
0.2371277694820520	0.2713707819405146	0.4746704242630925	T	T	T
0.4575802877768448	0.3933821742054976	0.5165421562510799	T	T	T
0.4882365778744353	0.5269600692866588	0.4769808865765174	T	T	T
0.1933665528989322	0.1362985514511919	0.5114613887609523	T	T	T
0.6070059830789432	0.0624760301754959	0.5417309662194926	T	T	T
0.0674655658753943	0.6027702093132609	0.4476214977316051	T	T	T
0.0762628425490841	0.8479506488619363	0.5510503247202667	T	T	T
0.5922334442745727	0.8176146717048750	0.4373086487597574	T	T	T
0.8246063450625076	0.5738460243507065	0.5406352080586546	T	T	T
0.8386309987545392	0.1013531068223035	0.4491549037865368	T	T	T
0.9919495237670595	0.4812472743649202	0.4774561272199833	T	T	T
0.6782914460406220	0.1859063495003844	0.5115694139862673	T	T	T
0.3398031527323703	0.5993613254393181	0.5410380257806281	T	T	T
0.3370880456103639	0.0608413435486067	0.4475897646822493	T	T	T
0.0858934005938651	0.0677329152446815	0.5509305246403496	T	T	T
0.5975562022200059	0.5854860046769476	0.4371820495877252	T	T	T
0.6109888058177191	0.8161544876408260	0.5404347079340704	T	T	T
0.0673032433284202	0.8319568495785371	0.4493547076650522	T	T	T
0.5353456029493684	0.9849913959938186	0.4773476886240254	T	T	T
0.1433979331519768	0.6719510014704628	0.5114665885073021	T	T	T
0.0704272056920752	0.3315503065540407	0.5415913437259778	T	T	T
0.6104036876413222	0.3291416083988123	0.4476361049101747	T	T	T

0.8558234657021067	0.0772651265965609	0.5507243353376848	T	T	T
0.8244767205033221	0.5902164047683400	0.4371447390365816	T	T	T
0.5828834419319847	0.6023270302179519	0.5403114035124279	T	T	T
0.1087399845651452	0.0604144195628845	0.4492434861695716	T	T	T
0.3392197166881036	0.3313660904177676	0.5626164272352506	T	T	T

**Site 3:**

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.1539898045825509 0.0117348602194267 44.4205337057521348

In Sn O Pt

56 8 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7601299999999966	0.0111199999999982	0.3212997282865118	F	F	F
0.2434165335433676	0.9854015590178022	0.3303952552037757	F	F	F
0.7751763166389409	0.2373103908289238	0.3303952552037757	F	F	F
0.7758184051208019	0.7360378284433793	0.3303952583554732	F	F	F
0.0149432086993002	0.2262095211845576	0.3212997282865118	F	F	F
0.9921246538137325	0.7693967045361916	0.3303952552037757	F	F	F
0.4928005224042380	0.7693966968225325	0.3303952583554732	F	F	F
0.0028580599244989	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.5041760321789965	0.9965305487398979	0.3258474991741451	F	F	F
0.5754695993874179	0.3201690636836290	0.3988024242875312	F	F	F
0.1000335765341589	0.3427603350605963	0.3893470124551968	F	F	F
0.5996577811357540	0.8418219209004363	0.3888098595214231	F	F	F
0.0767109653050468	0.8183100051456691	0.3986376552181525	F	F	F
0.1114318610020959	0.56893220784448171	0.3988024242875312	F	F	F
0.5634797054024645	0.0941582901478952	0.3893470124551968	F	F	F
0.5641186345741858	0.5925506639960076	0.3888098595214231	F	F	F
0.1114494334935046	0.0701311676366885	0.3986376552181525	F	F	F
0.3261319662881945	0.1051291103740297	0.3988024242875312	F	F	F
0.3492093643680292	0.5573702775606932	0.3893470124551968	F	F	F
0.8488610604088223	0.5573745329822160	0.3888098595214231	F	F	F
0.8248676130051109	0.1057902286404513	0.3986376552181525	F	F	F
0.3383792532104977	0.8302004322606820	0.3937513645347082	F	F	F
0.8367796411124147	0.3315350310755605	0.3937513645347082	F	F	F
0.7420985760889067	0.4866741287148670	0.3303952583554732	F	F	F
0.3376277839809418	0.3314195471817456	0.3942364325472383	F	F	F
0.8376409987888778	0.8299810709125808	0.3937513645347082	F	F	F
0.7651759955176360	0.0149781581881053	0.5257929000092900	T	T	T

0.9113714428280999	0.6504473769610321	0.4657428765799633	T	T	T
0.4308343209463960	0.6767213125596149	0.4565288319303840	T	T	T
0.2459921468085054	0.9802800037635625	0.5329189730939632	T	T	T
0.9355930399706832	0.1749072868747705	0.4564073116207931	T	T	T
0.4079230239420050	0.1530502462456964	0.4663128125102343	T	T	T
0.2733944443558132	0.5064816479805097	0.5246002923694874	T	T	T
0.2111326402235781	0.7665470293045753	0.5224302862715490	T	T	T
0.4456467328053949	0.9037878634148327	0.4655957044387460	T	T	T
0.9013559613017342	0.4222236397524749	0.4562541675124115	T	T	T
0.7868282361383966	0.2351142428614726	0.5299843537483456	T	T	T
0.8968222346317978	0.9290119498543127	0.4561136568908341	T	T	T
0.4463578375353682	0.4004084408153763	0.4664069676919382	T	T	T
0.2284536828705091	0.2611179134846338	0.5230971701300277	T	T	T
0.0227466092496192	0.2212999506799358	0.5262959275985675	T	T	T
0.6584027299268692	0.4384860610200436	0.4659397414732908	T	T	T
0.6846802568217391	0.8925762962043171	0.4564022616856555	T	T	T
0.9839959315583392	0.7817315279965026	0.5292604903369864	T	T	T
0.1822569432231849	0.8908745277925951	0.4561106124520038	T	T	T
0.1618025812863248	0.4385092538710626	0.4665941827348049	T	T	T
0.5194425877508266	0.2203463964628197	0.5223171022087395	T	T	T
0.6723325546232801	0.6640008381610385	0.4605951245041400	T	T	T
0.0025553909106639	0.4892454752110201	0.5281001318925905	T	T	T
0.6724562710723809	0.1634933996497173	0.4611547864164526	T	T	T
0.4994486373008911	0.5102742367532240	0.5286764738600725	T	T	T
0.1709403357911099	0.1640563621933363	0.4616216852670928	T	T	T
0.5171811339527497	0.9944975512565082	0.5278420667917585	T	T	T
0.1718797326200592	0.6631200362282571	0.4608907320230501	T	T	T
0.2318915289287986	0.7582958518869418	0.3212997282865118	F	F	F
0.5035339362280098	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.2649692708826521	0.5089321445234489	0.3212997314382093	F	F	F
0.0035676858993980	0.9990756731962591	0.3258474928707500	F	F	F
0.7495700149996739	0.4870613981305532	0.5318181767201628	T	T	T
0.7789492019786226	0.7356235959211467	0.5325058266381715	T	T	T
0.5064399551943430	0.7685724777817275	0.5327168933395228	T	T	T
0.0027084493470738	0.0018568914663031	0.5319433935831430	T	T	T
0.2312494253227371	0.2595683989238466	0.3212997314382093	F	F	F
0.5142673705564675	0.2262095135495770	0.3212997314382093	F	F	F
0.8197245306682390	0.8569508763088862	0.3438201600901110	F	F	F
0.3987081608861587	0.9354815458449366	0.3117293471016254	F	F	F
0.9209922397635992	0.1532890848265680	0.3018948934479724	F	F	F
0.1730362783713417	0.4314418369345745	0.3139001625321427	F	F	F
0.3283148989230753	0.8129202287039874	0.3438201600901110	F	F	F
0.6696296955644030	0.3927234531479655	0.3117293471016254	F	F	F
0.9299447303656834	0.9155171710171928	0.3018948934479724	F	F	F

0.4004008100581657	0.1679411731758620	0.3139001625321427	F	F	F
0.8631193247769602	0.3221544605376110	0.3438201600901110	F	F	F
0.9417661356484075	0.6640191810841145	0.3117293471016254	F	F	F
0.1588437830399343	0.9234787908990896	0.3018948934479724	F	F	F
0.4368057691204541	0.3953728437525825	0.3139001625321427	F	F	F
0.1873433418511681	0.1386553765605854	0.3078748193479939	F	F	F
0.6083597115729162	0.0601247068673771	0.3399656321113582	F	F	F
0.0860756361414658	0.8423171707979833	0.3498000846394120	F	F	F
0.8340315940587928	0.5641644156990608	0.3377948166808480	F	F	F
0.6787529268564683	0.1826860237720780	0.3078748193479939	F	F	F
0.3374381297247666	0.6028827994856698	0.3399656321113582	F	F	F
0.0771230884463421	0.0800890850007647	0.3498000846394120	F	F	F
0.6066670156113929	0.8276650793790878	0.3377948166808480	F	F	F
0.1439485478357412	0.6734517452805591	0.3078748193479939	F	F	F
0.0653017366889372	0.3315870247342687	0.3399656321113582	F	F	F
0.8482240925665394	0.0721274080750689	0.3498000846394120	F	F	F
0.5702621035290605	0.6002333619871152	0.3377948166808480	F	F	F
0.5198187726736379	0.4710367487921232	0.3758420117279684	F	F	F
0.9426805682623609	0.3924764106726286	0.4077528311564294	F	F	F
0.4180544851025232	0.1777170637495047	0.4180630728800807	F	F	F
0.1697176184977991	0.8957742608203105	0.4059099647347324	F	F	F
0.0157015007558172	0.5134525626218860	0.3758420117279684	F	F	F
0.6712180398470551	0.9354949379856805	0.4077528311564294	F	F	F
0.4114658565705795	0.4116378360625106	0.4180630728800807	F	F	F
0.9398975868734993	0.1628324598200166	0.4059099647347324	F	F	F
0.4767584900125641	0.0098831757007858	0.3758420117279684	F	F	F
0.3993614858472370	0.6636585286003154	0.4077528311564294	F	F	F
0.1841461447858563	0.4047562752544636	0.4180630728800807	F	F	F
0.9035843176360459	0.9330345621793654	0.4059099647347324	F	F	F
0.1547644004390776	0.1916458452052581	0.4119880130487985	F	F	F
0.7307997352263129	0.2707766336215016	0.3797524253477320	F	F	F
0.2566607160774623	0.4851340867038942	0.3698925933407295	F	F	F
0.5066993712809946	0.7643982900759099	0.3817393573504972	F	F	F
0.6603693326687292	0.1487235043712474	0.4119880130487985	F	F	F
0.0053116273190454	0.7243880503595861	0.3797524253477320	F	F	F
0.2643070694647278	0.2506682497746482	0.3698925933407295	F	F	F
0.7342339744034376	0.4998948800842840	0.3817393573504972	F	F	F
0.1983330781461632	0.6537794249032487	0.4119880130487985	F	F	F
0.2762959286617175	0.9991836010246260	0.3797524253477320	F	F	F
0.4911154325054667	0.2586069723533484	0.3698925933407295	F	F	F
0.7714717372890760	0.7274977081085865	0.3817393573504972	F	F	F
0.8192010517031060	0.8516314554458353	0.5418426088927583	T	T	T
0.8552004403073269	0.8029003557610834	0.4439652436242253	T	T	T
0.2738690118171032	0.7267100410394194	0.4748877096198820	T	T	T

0.4073164955386255	0.9321593563846968	0.5155940728673173	T	T	T
0.7538029681823992	0.5089594529923998	0.4858498837357816	T	T	T
0.9365360590330376	0.1429467426349439	0.5049602218680680	T	T	T
0.5018646244682047	0.2281686300781315	0.4729218344143039	T	T	T
0.1761748706402093	0.4351023144346989	0.5207892925421901	T	T	T
0.3694105159243081	0.8252391726532624	0.5576806955563016	T	T	T
0.3496783949184755	0.8470630259194778	0.4439313251478472	T	T	T
0.0061166444741707	0.2678919982468019	0.4758066063851189	T	T	T
0.6663417305224387	0.4024762129699527	0.5177719291039674	T	T	T
0.7463475253460305	0.7435550146512783	0.4863472678526528	T	T	T
0.9299534572187511	0.9306470651250642	0.5042121611484566	T	T	T
0.2767373719309094	0.4945850853590140	0.4742973577832141	T	T	T
0.3979386073022178	0.1668811276251882	0.5202204723858267	T	T	T
0.8588941104125810	0.3307861433518482	0.5421011805693201	T	T	T
0.8106411268756245	0.3411805838253029	0.4440306687712244	T	T	T
0.7340235934894273	0.9984290276640314	0.4755551152557407	T	T	T
0.9434618278226977	0.6592035173892717	0.5164801560706713	T	T	T
0.5187555813141365	0.7375024042793054	0.4865757025693335	T	T	T
0.1562292711867951	0.9250162906430118	0.5054106387704291	T	T	T
0.2373755667811215	0.2692266023505541	0.4737003291984072	T	T	T
0.4466071595056712	0.3886146562973936	0.5179377715274620	T	T	T
0.4861087130874822	0.5260829897926043	0.4795042976615711	T	T	T
0.1936613109229665	0.1325368611853667	0.5112420972694471	T	T	T
0.6070344572259158	0.0664906298365844	0.5420173555848321	T	T	T
0.0671496855795262	0.6016647270122368	0.4478226720197538	T	T	T
0.0681846760527898	0.8521318026036584	0.5507286813216857	T	T	T
0.5921519736326285	0.8182714926766308	0.4379363667944641	T	T	T
0.8313791843452295	0.5691507494278443	0.5416292517739949	T	T	T
0.8399212374338662	0.1006794119508557	0.4491062825977014	T	T	T
0.9978585150802514	0.4780790463688802	0.4789764066468692	T	T	T
0.6823224690614844	0.1869198101672298	0.5101732450721684	T	T	T
0.3566311924500730	0.5517713139645827	0.5573148365723558	T	T	T
0.3375781757034646	0.0601874189400375	0.4478186858205132	T	T	T
0.0857073779100821	0.0678299707685123	0.5520639025337647	T	T	T
0.5963923518593663	0.5850475315042487	0.4380438117678656	T	T	T
0.6110732842356941	0.8229692412566491	0.5418782089298246	T	T	T
0.0675261489613717	0.8326551224863400	0.4497828951863206	T	T	T
0.5326372121867630	0.9887150534397938	0.4787393559699925	T	T	T
0.1418450123432149	0.6700685451738975	0.5109842979759334	T	T	T
0.0739930613081553	0.3284116866855031	0.5425841800330214	T	T	T
0.6091737811705277	0.3317651697372227	0.4479557301993994	T	T	T
0.8531885068044991	0.0801785457049914	0.5513762595639051	T	T	T
0.8265362158335017	0.5889104886910160	0.4379136671921261	T	T	T
0.5943036600378181	0.6032248923123744	0.5420902131923689	T	T	T

0.1068452670566819 0.0601022899454664 0.4492914317705137 T T T  
0.3620135134290740 0.6883680094495583 0.5583176521287918 T T T

**Site 4:**

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.1539898045825509 0.0117348602194267 44.4205337057521348

In Sn O Pt

56 8 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7601299999999966 0.0111199999999982 0.3212997282865118 F F F  
0.2434165335433676 0.9854015590178022 0.3303952552037757 F F F  
0.7751763166389409 0.2373103908289238 0.3303952552037757 F F F  
0.7758184051208019 0.7360378284433793 0.3303952583554732 F F F  
0.0149432086993002 0.2262095211845576 0.3212997282865118 F F F  
0.9921246538137325 0.7693967045361916 0.3303952552037757 F F F  
0.4928005224042380 0.7693966968225325 0.3303952583554732 F F F  
0.0028580599244989 0.4978031261506217 0.3258474991741451 F F F  
0.5041760321789965 0.9965305487398979 0.3258474991741451 F F F  
0.5754695993874179 0.3201690636836290 0.3988024242875312 F F F  
0.1000335765341589 0.3427603350605963 0.3893470124551968 F F F  
0.5996577811357540 0.8418219209004363 0.3888098595214231 F F F  
0.0767109653050468 0.8183100051456691 0.3986376552181525 F F F  
0.1114318610020959 0.5689322078448171 0.3988024242875312 F F F  
0.5634797054024645 0.0941582901478952 0.3893470124551968 F F F  
0.5641186345741858 0.5925506639960076 0.3888098595214231 F F F  
0.1114494334935046 0.0701311676366885 0.3986376552181525 F F F  
0.3261319662881945 0.1051291103740297 0.3988024242875312 F F F  
0.3492093643680292 0.5573702775606932 0.3893470124551968 F F F  
0.8488610604088223 0.5573745329822160 0.3888098595214231 F F F  
0.8248676130051109 0.1057902286404513 0.3986376552181525 F F F  
0.3383792532104977 0.8302004322606820 0.3937513645347082 F F F  
0.8367796411124147 0.3315350310755605 0.3937513645347082 F F F  
0.7420985760889067 0.4866741287148670 0.3303952583554732 F F F  
0.3376277839809418 0.3314195471817456 0.3942364325472383 F F F  
0.8376409987888778 0.8299810709125808 0.3937513645347082 F F F  
0.7641691486673508 0.0125390006253327 0.5257175888638148 T T T  
0.9122107054520889 0.6505623736947503 0.4655414516761064 T T T  
0.4298924365359854 0.6770744233360981 0.4563656269183029 T T T

0.2559125786415192	0.9751934721045737	0.5325820264548404	T	T	T
0.9348894137539524	0.1745438421856601	0.4563004558698743	T	T	T
0.4076813052437940	0.1532425960928834	0.4664165102427604	T	T	T
0.2695380055949773	0.5110730717984640	0.5230204019769353	T	T	T
0.2308820542948729	0.7585248863523072	0.5266206157196808	T	T	T
0.4466316295849538	0.9033934939304381	0.4650195330396161	T	T	T
0.8999218381546386	0.4231331769200041	0.4560831870078617	T	T	T
0.7871323117266562	0.2319623185142995	0.5298270704192433	T	T	T
0.8971183473645907	0.9285997264935707	0.4561382358219060	T	T	T
0.4461079005937322	0.4005012968881590	0.4665381531191887	T	T	T
0.2276674816650540	0.2590069909178301	0.5229691034220562	T	T	T
0.0173839196976561	0.2272374455193780	0.5251111171258328	T	T	T
0.6578339098406601	0.4376626896174713	0.4656740997747310	T	T	T
0.6853325827857999	0.8919145841988396	0.4562102733172580	T	T	T
0.9883805744662084	0.7792432468377958	0.5298841355635724	T	T	T
0.1815484583829913	0.8914182131364626	0.4573575636560850	T	T	T
0.1616753764575881	0.4383882883283931	0.4665033226608991	T	T	T
0.5176343361291975	0.2201792245799570	0.5229768098317771	T	T	T
0.6727084902179000	0.6632325000950079	0.4600367610377301	T	T	T
0.0011689078851221	0.4903160586682141	0.5276092523970569	T	T	T
0.6717149602620934	0.1629898797612839	0.4613288130536694	T	T	T
0.4973260678657005	0.5107227616115637	0.5281470450059146	T	T	T
0.1704695168532521	0.1634232579951123	0.4615179055540022	T	T	T
0.5205807858249605	0.9903717207787991	0.5274719834257765	T	T	T
0.1720252601130896	0.6658901966540782	0.4614832976152588	T	T	T
0.2318915289287986	0.7582958518869418	0.3212997282865118	F	F	F
0.5035339362280098	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.2649692708826521	0.5089321445234489	0.3212997314382093	F	F	F
0.0035676858993980	0.9990756731962591	0.3258474928707500	F	F	F
0.7450095021545005	0.4867018403887028	0.5314834440154141	T	T	T
0.7785005609591116	0.7348076697052466	0.5318861198532486	T	T	T
0.5020292082959420	0.7637913667867676	0.5309454221947454	T	T	T
0.0022759137191303	0.9969280458092615	0.5313434525115638	T	T	T
0.2312494253227371	0.2595683989238466	0.3212997314382093	F	F	F
0.5142673705564675	0.2262095135495770	0.3212997314382093	F	F	F
0.8197245306682390	0.8569508763088862	0.3438201600901110	F	F	F
0.3987081608861587	0.9354815458449366	0.3117293471016254	F	F	F
0.9209922397635992	0.1532890848265680	0.3018948934479724	F	F	F
0.1730362783713417	0.4314418369345745	0.3139001625321427	F	F	F
0.3283148989230753	0.8129202287039874	0.3438201600901110	F	F	F
0.6696296955644030	0.3927234531479655	0.3117293471016254	F	F	F
0.9299447303656834	0.9155171710171928	0.3018948934479724	F	F	F
0.4004008100581657	0.1679411731758620	0.3139001625321427	F	F	F
0.8631193247769602	0.3221544605376110	0.3438201600901110	F	F	F



0.9417661356484075	0.6640191810841145	0.3117293471016254	F	F	F
0.1588437830399343	0.9234787908990896	0.3018948934479724	F	F	F
0.4368057691204541	0.3953728437525825	0.3139001625321427	F	F	F
0.1873433418511681	0.1386553765605854	0.3078748193479939	F	F	F
0.6083597115729162	0.0601247068673771	0.3399656321113582	F	F	F
0.0860756361414658	0.8423171707979833	0.3498000846394120	F	F	F
0.8340315940587928	0.5641644156990608	0.3377948166808480	F	F	F
0.6787529268564683	0.1826860237720780	0.3078748193479939	F	F	F
0.3374381297247666	0.6028827994856698	0.3399656321113582	F	F	F
0.0771230884463421	0.0800890850007647	0.3498000846394120	F	F	F
0.6066670156113929	0.8276650793790878	0.3377948166808480	F	F	F
0.1439485478357412	0.6734517452805591	0.3078748193479939	F	F	F
0.0653017366889372	0.3315870247342687	0.3399656321113582	F	F	F
0.8482240925665394	0.0721274080750689	0.3498000846394120	F	F	F
0.5702621035290605	0.6002333619871152	0.3377948166808480	F	F	F
0.5198187726736379	0.4710367487921232	0.3758420117279684	F	F	F
0.9426805682623609	0.3924764106726286	0.4077528311564294	F	F	F
0.4180544851025232	0.1777170637495047	0.4180630728800807	F	F	F
0.1697176184977991	0.8957742608203105	0.4059099647347324	F	F	F
0.0157015007558172	0.5134525626218860	0.3758420117279684	F	F	F
0.6712180398470551	0.9354949379856805	0.4077528311564294	F	F	F
0.4114658565705795	0.4116378360625106	0.4180630728800807	F	F	F
0.9398975868734993	0.1628324598200166	0.4059099647347324	F	F	F
0.4767584900125641	0.0098831757007858	0.3758420117279684	F	F	F
0.3993614858472370	0.6636585286003154	0.4077528311564294	F	F	F
0.1841461447858563	0.4047562752544636	0.4180630728800807	F	F	F
0.9035843176360459	0.9330345621793654	0.4059099647347324	F	F	F
0.1547644004390776	0.1916458452052581	0.4119880130487985	F	F	F
0.7307997352263129	0.2707766336215016	0.3797524253477320	F	F	F
0.2566607160774623	0.4851340867038942	0.3698925933407295	F	F	F
0.5066993712809946	0.7643982900759099	0.3817393573504972	F	F	F
0.6603693326687292	0.1487235043712474	0.4119880130487985	F	F	F
0.0053116273190454	0.7243880503595861	0.3797524253477320	F	F	F
0.2643070694647278	0.2506682497746482	0.3698925933407295	F	F	F
0.7342339744034376	0.4998948800842840	0.3817393573504972	F	F	F
0.1983330781461632	0.6537794249032487	0.4119880130487985	F	F	F
0.2762959286617175	0.9991836010246260	0.3797524253477320	F	F	F
0.4911154325054667	0.2586069723533484	0.3698925933407295	F	F	F
0.7714717372890760	0.7274977081085865	0.3817393573504972	F	F	F
0.8205265325407659	0.8490629231195663	0.5418195953595444	T	T	T
0.8558187207677256	0.8027570114100849	0.4437967072502078	T	T	T
0.2749182701931869	0.7284864372883973	0.4762800617974592	T	T	T
0.4135289049312316	0.9301955207395295	0.5155861886895263	T	T	T
0.7521227344712407	0.5094625900059466	0.4856435651639767	T	T	T

0.9366090508846865	0.1407265126246023	0.5046442391771945	T	T	T
0.5002292043335411	0.2300559005849572	0.4736104686260810	T	T	T
0.1761773354095637	0.4344407792538960	0.5201511823746482	T	T	T
0.3509727514176850	0.8005685083764158	0.5403758016409966	T	T	T
0.3488602826273614	0.8478573045638281	0.4439402406818978	T	T	T
0.0046044604356489	0.2690596540854048	0.4752664124439026	T	T	T
0.6656473570176128	0.3991100916479433	0.5167446421947343	T	T	T
0.7471583374962816	0.7430250701128205	0.4858648400927233	T	T	T
0.9305563431056980	0.9268728617020032	0.5043880152560386	T	T	T
0.2768453021450664	0.4945532560620222	0.4735764528591475	T	T	T
0.3975274678566589	0.1647122510966368	0.5201968081368710	T	T	T
0.8556054586460430	0.3319265696311254	0.5417588168039665	T	T	T
0.8102534403341590	0.3411183066357135	0.4438654236421408	T	T	T
0.7343168693102606	0.9974939704906874	0.4755897488944962	T	T	T
0.9435001314342519	0.6584554032068027	0.5166553177882789	T	T	T
0.5204496371487859	0.7365290596827185	0.4852190795200348	T	T	T
0.1521949876838901	0.9282604730504052	0.5074461712994386	T	T	T
0.2370400004912957	0.2684578247497657	0.4736310621829024	T	T	T
0.4433496298004785	0.3896884023708379	0.5205189897059559	T	T	T
0.4856450842758100	0.5255093798406795	0.4789919277957024	T	T	T
0.1881803560627909	0.1321125786639719	0.5107741472003907	T	T	T
0.6062293900070503	0.0646513865113416	0.5422993478996316	T	T	T
0.0681003731533462	0.6022404306216192	0.4479737629669318	T	T	T
0.0758524178249730	0.8479756548843861	0.5513968899140845	T	T	T
0.5928532421162680	0.8178489239499748	0.4376554512092571	T	T	T
0.8273447953383408	0.5713143055234635	0.5408164241495301	T	T	T
0.8393388301350977	0.1002251595933706	0.4491078541847250	T	T	T
0.9969984991646684	0.4786462001092758	0.4785308498487862	T	T	T
0.6805977153270006	0.1850702574695949	0.5103321131739913	T	T	T
0.3367853770719628	0.5985386425822226	0.5429515087682542	T	T	T
0.3375539941288418	0.0600159923987259	0.4478402614262685	T	T	T
0.0421200154521183	0.0968816029625617	0.5567547640713238	T	T	T
0.5965565165225581	0.5840608838608607	0.4377852832408239	T	T	T
0.6117619591779853	0.8159732862350305	0.5411468198017265	T	T	T
0.0675207496070967	0.8339614048367979	0.4496337827906544	T	T	T
0.5332882280493932	0.9888344309763980	0.4782467594055236	T	T	T
0.1420632393537578	0.6749498069057230	0.5108328623760242	T	T	T
0.0722560219615191	0.3303037424727444	0.5420674704516668	T	T	T
0.6092097104605196	0.3302673527350610	0.4479024321863275	T	T	T
0.8516712470808718	0.0760368446418530	0.5508133036057323	T	T	T
0.8266032396849292	0.5890095591678808	0.4377086002162877	T	T	T
0.5839926679512666	0.5997735111215577	0.5411435750978570	T	T	T
0.1062834192612852	0.0598416787417873	0.4492847572612240	T	T	T
0.1638048405936819	0.0406567907700325	0.5831132383008896	T	T	T

**Site 5:**

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000  
-0.1539898045825509 0.0117348602194267 44.4205337057521348

In Sn O Pt

56 8 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7601299999999966	0.0111199999999982	0.3212997282865118	F	F	F
0.2434165335433676	0.9854015590178022	0.3303952552037757	F	F	F
0.7751763166389409	0.2373103908289238	0.3303952552037757	F	F	F
0.7758184051208019	0.7360378284433793	0.3303952583554732	F	F	F
0.0149432086993002	0.2262095211845576	0.3212997282865118	F	F	F
0.9921246538137325	0.7693967045361916	0.3303952552037757	F	F	F
0.4928005224042380	0.7693966968225325	0.3303952583554732	F	F	F
0.0028580599244989	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.5041760321789965	0.9965305487398979	0.3258474991741451	F	F	F
0.5754695993874179	0.3201690636836290	0.3988024242875312	F	F	F
0.1000335765341589	0.3427603350605963	0.3893470124551968	F	F	F
0.5996577811357540	0.8418219209004363	0.3888098595214231	F	F	F
0.0767109653050468	0.8183100051456691	0.3986376552181525	F	F	F
0.1114318610020959	0.5689322078448171	0.3988024242875312	F	F	F
0.5634797054024645	0.0941582901478952	0.3893470124551968	F	F	F
0.5641186345741858	0.5925506639960076	0.3888098595214231	F	F	F
0.1114494334935046	0.0701311676366885	0.3986376552181525	F	F	F
0.3261319662881945	0.1051291103740297	0.3988024242875312	F	F	F
0.3492093643680292	0.5573702775606932	0.3893470124551968	F	F	F
0.8488610604088223	0.5573745329822160	0.3888098595214231	F	F	F
0.8248676130051109	0.1057902286404513	0.3986376552181525	F	F	F
0.3383792532104977	0.8302004322606820	0.3937513645347082	F	F	F
0.8367796411124147	0.3315350310755605	0.3937513645347082	F	F	F
0.7420985760889067	0.4866741287148670	0.3303952583554732	F	F	F
0.3376277839809418	0.3314195471817456	0.3942364325472383	F	F	F
0.8376409987888778	0.8299810709125808	0.3937513645347082	F	F	F
0.7682724150875163	0.0120135242094843	0.5254106376270072	T	T	T
0.9111551573291078	0.6506034211733152	0.4654540375633897	T	T	T
0.4306024227654488	0.6741358128982091	0.4571466007377056	T	T	T
0.2419095151493092	0.9808349254632530	0.5295849286886113	T	T	T
0.9333247269271330	0.1751630912458810	0.4574998979021333	T	T	T

0.4104150981641744	0.1553303077326076	0.4672978678747930	T	T	T
0.2674996152582448	0.5148685848529713	0.5211004959277055	T	T	T
0.2323207285557226	0.7570052705476760	0.5259823917387505	T	T	T
0.4444502468834358	0.9050163301780201	0.4657191308409886	T	T	T
0.8997623640573319	0.4229649326060943	0.4560474994142825	T	T	T
0.7743348422919798	0.2393076477626686	0.5361169249122255	T	T	T
0.8967525261763555	0.9284226883190388	0.4560854150123278	T	T	T
0.4460403224240154	0.4002767670725396	0.4664544915111517	T	T	T
0.2299862285702519	0.2615360672954101	0.5224506806383512	T	T	T
0.0173694482702899	0.2241507231817753	0.5260732350715628	T	T	T
0.6571017146710731	0.4384273073072791	0.4649519388343054	T	T	T
0.6845740460771941	0.8921211395641448	0.4562296451351055	T	T	T
0.9884266054551982	0.7812174014252687	0.5299037613710020	T	T	T
0.1820718968134834	0.8903912514555549	0.4564121852955237	T	T	T
0.1609306426682699	0.4397877011332468	0.4662015616312241	T	T	T
0.5307919656646449	0.2259602650358862	0.5272692025015268	T	T	T
0.6713826214734888	0.6649519599751145	0.4600543062737706	T	T	T
0.0001570026582950	0.4893995573981648	0.5272038673729462	T	T	T
0.6722838896572327	0.1623414600887390	0.4612829739738444	T	T	T
0.5078030440376780	0.4882232996147231	0.5317975311296884	T	T	T
0.1702784373750343	0.1651600079352769	0.4614425364361637	T	T	T
0.5181931818038381	0.9948423251430255	0.5274833870666679	T	T	T
0.1701680782655479	0.6670671487775646	0.4609558812668896	T	T	T
0.2318915289287986	0.7582958518869418	0.3212997282865118	F	F	F
0.5035339362280098	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.2649692708826521	0.5089321445234489	0.3212997314382093	F	F	F
0.0035676858993980	0.9990756731962591	0.3258474928707500	F	F	F
0.7447839408717389	0.4870073547503572	0.5300749206756837	T	T	T
0.7774618267972431	0.7356088714960372	0.5317215067853194	T	T	T
0.4986365572539143	0.7657596857366126	0.5316431001932113	T	T	T
0.0045395799818094	0.0001530999562750	0.5313454104975368	T	T	T
0.2312494253227371	0.2595683989238466	0.3212997314382093	F	F	F
0.5142673705564675	0.2262095135495770	0.3212997314382093	F	F	F
0.8197245306682390	0.8569508763088862	0.3438201600901110	F	F	F
0.3987081608861587	0.9354815458449366	0.3117293471016254	F	F	F
0.9209922397635992	0.1532890848265680	0.3018948934479724	F	F	F
0.1730362783713417	0.4314418369345745	0.3139001625321427	F	F	F
0.3283148989230753	0.8129202287039874	0.3438201600901110	F	F	F
0.6696296955644030	0.3927234531479655	0.3117293471016254	F	F	F
0.9299447303656834	0.9155171710171928	0.3018948934479724	F	F	F
0.4004008100581657	0.1679411731758620	0.3139001625321427	F	F	F
0.8631193247769602	0.3221544605376110	0.3438201600901110	F	F	F
0.9417661356484075	0.6640191810841145	0.3117293471016254	F	F	F
0.1588437830399343	0.9234787908990896	0.3018948934479724	F	F	F

0.4368057691204541	0.3953728437525825	0.3139001625321427	F	F	F
0.1873433418511681	0.1386553765605854	0.3078748193479939	F	F	F
0.6083597115729162	0.0601247068673771	0.3399656321113582	F	F	F
0.0860756361414658	0.8423171707979833	0.3498000846394120	F	F	F
0.8340315940587928	0.5641644156990608	0.3377948166808480	F	F	F
0.6787529268564683	0.1826860237720780	0.3078748193479939	F	F	F
0.3374381297247666	0.6028827994856698	0.3399656321113582	F	F	F
0.0771230884463421	0.0800890850007647	0.3498000846394120	F	F	F
0.6066670156113929	0.8276650793790878	0.3377948166808480	F	F	F
0.1439485478357412	0.6734517452805591	0.3078748193479939	F	F	F
0.0653017366889372	0.3315870247342687	0.3399656321113582	F	F	F
0.8482240925665394	0.0721274080750689	0.3498000846394120	F	F	F
0.5702621035290605	0.6002333619871152	0.3377948166808480	F	F	F
0.5198187726736379	0.4710367487921232	0.3758420117279684	F	F	F
0.9426805682623609	0.3924764106726286	0.4077528311564294	F	F	F
0.4180544851025232	0.1777170637495047	0.4180630728800807	F	F	F
0.1697176184977991	0.8957742608203105	0.4059099647347324	F	F	F
0.0157015007558172	0.5134525626218860	0.3758420117279684	F	F	F
0.6712180398470551	0.9354949379856805	0.4077528311564294	F	F	F
0.4114658565705795	0.4116378360625106	0.4180630728800807	F	F	F
0.9398975868734993	0.1628324598200166	0.4059099647347324	F	F	F
0.4767584900125641	0.0098831757007858	0.3758420117279684	F	F	F
0.3993614858472370	0.6636585286003154	0.4077528311564294	F	F	F
0.1841461447858563	0.4047562752544636	0.4180630728800807	F	F	F
0.9035843176360459	0.9330345621793654	0.4059099647347324	F	F	F
0.1547644004390776	0.1916458452052581	0.4119880130487985	F	F	F
0.7307997352263129	0.2707766336215016	0.3797524253477320	F	F	F
0.2566607160774623	0.4851340867038942	0.3698925933407295	F	F	F
0.5066993712809946	0.7643982900759099	0.3817393573504972	F	F	F
0.6603693326687292	0.1487235043712474	0.4119880130487985	F	F	F
0.0053116273190454	0.7243880503595861	0.3797524253477320	F	F	F
0.2643070694647278	0.2506682497746482	0.3698925933407295	F	F	F
0.7342339744034376	0.4998948800842840	0.3817393573504972	F	F	F
0.1983330781461632	0.6537794249032487	0.4119880130487985	F	F	F
0.2762959286617175	0.9991836010246260	0.3797524253477320	F	F	F
0.4911154325054667	0.2586069723533484	0.3698925933407295	F	F	F
0.7714717372890760	0.7274977081085865	0.3817393573504972	F	F	F
0.8219563661834945	0.8480632605597913	0.5417284185958454	T	T	T
0.8555315859960577	0.8019145323640884	0.4435005685653010	T	T	T
0.2749245186249762	0.7270524432812711	0.4754928274850149	T	T	T
0.4085363360793666	0.9350570139654095	0.5172307112040131	T	T	T
0.7547740949689014	0.5130731992281272	0.4848728254085018	T	T	T
0.9289050356955058	0.1485640422426356	0.5063747878153309	T	T	T
0.5048150655372761	0.2279323543660743	0.4749084638705837	T	T	T

0.1744583832646317	0.4372665892177253	0.5196816709893826	T	T	T
0.3420274062217949	0.8120726384387362	0.5418424695215582	T	T	T
0.3494653398106312	0.8472060190129012	0.4438830733486125	T	T	T
0.0050624603898827	0.2689820069508281	0.4756755876711954	T	T	T
0.6751204855527683	0.4001163594280686	0.5127797830004012	T	T	T
0.7468839026344655	0.7437427816043550	0.4857850472116875	T	T	T
0.9321955872672594	0.9274271043752832	0.5040837110099681	T	T	T
0.2734548837394565	0.4976280590156908	0.4716354960738334	T	T	T
0.3991852333273905	0.1696501120085933	0.5213102158945138	T	T	T
0.8562260729480031	0.3366130402567327	0.5432279545187978	T	T	T
0.8103769883084656	0.3414892836745729	0.4435752912867814	T	T	T
0.7353502976821293	0.9952924647238038	0.4748841984956625	T	T	T
0.9431115060010862	0.6575772497012594	0.5171115468384183	T	T	T
0.5175182384208800	0.7389625925727197	0.4857316273133675	T	T	T
0.1511964647999384	0.9231110601232722	0.5046077963364948	T	T	T
0.2381024608146200	0.2702045464734236	0.4732645895098926	T	T	T
0.4306617783732174	0.3920811267637684	0.5160388074998842	T	T	T
0.4875331088048265	0.5232347720729400	0.4803826821498630	T	T	T
0.1919797026780704	0.1351949984537786	0.5105024429327404	T	T	T
0.6104156288844416	0.0611830946878817	0.5415000141698741	T	T	T
0.0657883980155359	0.6031392449440941	0.4475309607366331	T	T	T
0.0784382968182485	0.8476558638286270	0.5507153993636579	T	T	T
0.5910101208134237	0.8193645393611941	0.4377320441137430	T	T	T
0.8265378284903206	0.5712363151173722	0.5402917900359917	T	T	T
0.8402712460579320	0.0994811703276395	0.4487968798684621	T	T	T
0.9972205562728863	0.4785645169070705	0.4782235217587888	T	T	T
0.6914130281908261	0.1774648681636440	0.5087116477309771	T	T	T
0.3390970868291725	0.5975539746847236	0.5409042843373778	T	T	T
0.3377055022840463	0.0620135553877611	0.4481813750554164	T	T	T
0.0869139270281095	0.0690172929592923	0.5508975330553263	T	T	T
0.5955003408453050	0.5854195307915619	0.4376929258722674	T	T	T
0.6104977208716569	0.8171050760993753	0.5407136185661179	T	T	T
0.0667097943153551	0.8339598126818282	0.4490376621608931	T	T	T
0.5319907214755031	0.9888512615688316	0.4784763666865942	T	T	T
0.1396045593624098	0.6764372490216577	0.5100766176556590	T	T	T
0.0745551382025291	0.3291808053241202	0.5417275165564790	T	T	T
0.6089484572890481	0.3304137602050788	0.4472145027310478	T	T	T
0.8588377307478928	0.0709134258878795	0.5520507476051968	T	T	T
0.8259643060053428	0.5897806340863779	0.4373702316371094	T	T	T
0.5863760375002799	0.5998685016743703	0.5406361837806086	T	T	T
0.1058642231561048	0.0609249978507281	0.4493602404350250	T	T	T
0.5956147045512326	0.3215509902867872	0.5692448831758783	T	T	T

Site 6:

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.1539898045825509 0.0117348602194267 44.4205337057521348

In Sn O Pt

56 8 96 1

Selective dynamics

Direct

0.7601299999999966	0.0111199999999982	0.3212997282865118	F	F	F
0.2434165335433676	0.9854015590178022	0.3303952552037757	F	F	F
0.7751763166389409	0.2373103908289238	0.3303952552037757	F	F	F
0.7758184051208019	0.7360378284433793	0.3303952583554732	F	F	F
0.0149432086993002	0.2262095211845576	0.3212997282865118	F	F	F
0.9921246538137325	0.7693967045361916	0.3303952552037757	F	F	F
0.4928005224042380	0.7693966968225325	0.3303952583554732	F	F	F
0.0028580599244989	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.5041760321789965	0.9965305487398979	0.3258474991741451	F	F	F
0.5754695993874179	0.3201690636836290	0.3988024242875312	F	F	F
0.1000335765341589	0.3427603350605963	0.3893470124551968	F	F	F
0.5996577811357540	0.8418219209004363	0.3888098595214231	F	F	F
0.0767109653050468	0.8183100051456691	0.3986376552181525	F	F	F
0.1114318610020959	0.5689322078448171	0.3988024242875312	F	F	F
0.5634797054024645	0.0941582901478952	0.3893470124551968	F	F	F
0.5641186345741858	0.5925506639960076	0.3888098595214231	F	F	F
0.1114494334935046	0.0701311676366885	0.3986376552181525	F	F	F
0.3261319662881945	0.1051291103740297	0.3988024242875312	F	F	F
0.3492093643680292	0.5573702775606932	0.3893470124551968	F	F	F
0.8488610604088223	0.5573745329822160	0.3888098595214231	F	F	F
0.8248676130051109	0.1057902286404513	0.3986376552181525	F	F	F
0.3383792532104977	0.8302004322606820	0.3937513645347082	F	F	F
0.8367796411124147	0.3315350310755605	0.3937513645347082	F	F	F
0.7420985760889067	0.4866741287148670	0.3303952583554732	F	F	F
0.3376277839809418	0.3314195471817456	0.3942364325472383	F	F	F
0.8376409987888778	0.8299810709125808	0.3937513645347082	F	F	F
0.7660130543636718	0.0148349684040732	0.5250641446016304	T	T	T
0.9095101825357498	0.6508065668025541	0.4641791837433074	T	T	T
0.4295729354079665	0.6775680108154913	0.4564281456559948	T	T	T
0.2413049273502442	0.9805516093618124	0.5299229252039345	T	T	T
0.9356414265692811	0.1743606260160191	0.4563292385668672	T	T	T
0.4073094673409229	0.1537424408651553	0.4664663880203910	T	T	T
0.2683682659795962	0.5145867123844573	0.5225582525864290	T	T	T
0.2282518091761181	0.7592477199600963	0.5261868391833191	T	T	T

0.4455836111671777	0.9041975952519944	0.4658635549805278	T	T	T
0.9022215112328815	0.4229528339223684	0.4568261753087411	T	T	T
0.7879161931938702	0.2333686894345760	0.5294944528315032	T	T	T
0.8976632169814421	0.9270357914675528	0.4570395276677939	T	T	T
0.4451759717168151	0.4014799647576346	0.4664008341174833	T	T	T
0.2264330780910743	0.2637014107913890	0.5220919505747610	T	T	T
0.0210788421801568	0.2243351789461566	0.5258775889663058	T	T	T
0.6577487530062474	0.4382202567521346	0.4648612987626999	T	T	T
0.6848760849788971	0.8911821327451069	0.4566322233804971	T	T	T
0.9880263977388920	0.7717755809080936	0.5354299275530005	T	T	T
0.1819284736799232	0.8895193637976100	0.4563817430766028	T	T	T
0.1582072721688611	0.4404260750874579	0.4666616724807174	T	T	T
0.5172630571191181	0.2213344884172148	0.5223286287554073	T	T	T
0.6708825231045262	0.6656313928954730	0.4610052262327581	T	T	T
0.0038244811409910	0.5025509649546295	0.5317003882701713	T	T	T
0.6724699429334795	0.1632414270334588	0.4610941427402843	T	T	T
0.4973731134699825	0.5116223349927083	0.5278433672961879	T	T	T
0.1703919946740766	0.1644838870256417	0.4612669708536279	T	T	T
0.5241439955477611	0.9893735967452275	0.5276846810037221	T	T	T
0.1691553194245237	0.6665374736984507	0.4617100884330299	T	T	T
0.2318915289287986	0.7582958518869418	0.3212997282865118	F	F	F
0.5035339362280098	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.2649692708826521	0.5089321445234489	0.3212997314382093	F	F	F
0.0035676858993980	0.9990756731962591	0.3258474928707500	F	F	F
0.7431052629868904	0.4872954773383611	0.5304235390747014	T	T	T
0.7862548168435342	0.7320927417626242	0.5330533330406269	T	T	T
0.4986578915775278	0.7692451167731645	0.5322145942069842	T	T	T
0.0052430885061026	0.9966438785484352	0.5311028262035183	T	T	T
0.2312494253227371	0.2595683989238466	0.3212997314382093	F	F	F
0.5142673705564675	0.2262095135495770	0.3212997314382093	F	F	F
0.8197245306682390	0.8569508763088862	0.3438201600901110	F	F	F
0.3987081608861587	0.9354815458449366	0.3117293471016254	F	F	F
0.9209922397635992	0.1532890848265680	0.3018948934479724	F	F	F
0.1730362783713417	0.4314418369345745	0.3139001625321427	F	F	F
0.3283148989230753	0.8129202287039874	0.3438201600901110	F	F	F
0.6696296955644030	0.3927234531479655	0.3117293471016254	F	F	F
0.9299447303656834	0.9155171710171928	0.3018948934479724	F	F	F
0.4004008100581657	0.1679411731758620	0.3139001625321427	F	F	F
0.8631193247769602	0.3221544605376110	0.3438201600901110	F	F	F
0.9417661356484075	0.6640191810841145	0.3117293471016254	F	F	F
0.1588437830399343	0.9234787908990896	0.3018948934479724	F	F	F
0.4368057691204541	0.3953728437525825	0.3139001625321427	F	F	F
0.1873433418511681	0.1386553765605854	0.3078748193479939	F	F	F
0.6083597115729162	0.0601247068673771	0.3399656321113582	F	F	F



0.0860756361414658	0.8423171707979833	0.3498000846394120	F	F	F
0.8340315940587928	0.5641644156990608	0.3377948166808480	F	F	F
0.6787529268564683	0.1826860237720780	0.3078748193479939	F	F	F
0.3374381297247666	0.6028827994856698	0.3399656321113582	F	F	F
0.0771230884463421	0.0800890850007647	0.3498000846394120	F	F	F
0.6066670156113929	0.8276650793790878	0.3377948166808480	F	F	F
0.1439485478357412	0.6734517452805591	0.3078748193479939	F	F	F
0.0653017366889372	0.3315870247342687	0.3399656321113582	F	F	F
0.8482240925665394	0.0721274080750689	0.3498000846394120	F	F	F
0.5702621035290605	0.6002333619871152	0.3377948166808480	F	F	F
0.5198187726736379	0.4710367487921232	0.3758420117279684	F	F	F
0.9426805682623609	0.3924764106726286	0.4077528311564294	F	F	F
0.4180544851025232	0.1777170637495047	0.4180630728800807	F	F	F
0.1697176184977991	0.8957742608203105	0.4059099647347324	F	F	F
0.0157015007558172	0.5134525626218860	0.3758420117279684	F	F	F
0.6712180398470551	0.9354949379856805	0.4077528311564294	F	F	F
0.4114658565705795	0.4116378360625106	0.4180630728800807	F	F	F
0.9398975868734993	0.1628324598200166	0.4059099647347324	F	F	F
0.4767584900125641	0.0098831757007858	0.3758420117279684	F	F	F
0.3993614858472370	0.6636585286003154	0.4077528311564294	F	F	F
0.1841461447858563	0.4047562752544636	0.4180630728800807	F	F	F
0.9035843176360459	0.9330345621793654	0.4059099647347324	F	F	F
0.1547644004390776	0.1916458452052581	0.4119880130487985	F	F	F
0.7307997352263129	0.2707766336215016	0.3797524253477320	F	F	F
0.2566607160774623	0.4851340867038942	0.3698925933407295	F	F	F
0.5066993712809946	0.7643982900759099	0.3817393573504972	F	F	F
0.6603693326687292	0.1487235043712474	0.4119880130487985	F	F	F
0.0053116273190454	0.7243880503595861	0.3797524253477320	F	F	F
0.2643070694647278	0.2506682497746482	0.3698925933407295	F	F	F
0.7342339744034376	0.4998948800842840	0.3817393573504972	F	F	F
0.1983330781461632	0.6537794249032487	0.4119880130487985	F	F	F
0.2762959286617175	0.9991836010246260	0.3797524253477320	F	F	F
0.4911154325054667	0.2586069723533484	0.3698925933407295	F	F	F
0.7714717372890760	0.7274977081085865	0.3817393573504972	F	F	F
0.8093954845777608	0.8591518735701105	0.5395876269621671	T	T	T
0.8536733201392018	0.8037926248804794	0.4432260815128071	T	T	T
0.2755252373712036	0.7260566828723101	0.4755693390061538	T	T	T
0.4102299258137305	0.9352399619599367	0.5177192891139700	T	T	T
0.7500122610319706	0.5085598714201479	0.4847688872620474	T	T	T
0.9356176493855856	0.1435617421956073	0.5045329050659222	T	T	T
0.5000811337205979	0.2308500115424142	0.4731695111560690	T	T	T
0.1794584295925878	0.4350259164537129	0.5197882508127710	T	T	T
0.3410444059571098	0.8122634913678736	0.5414965716509100	T	T	T
0.3489010183777428	0.8481767137430100	0.4438636862160862	T	T	T

0.0060027047285819	0.2675463624927289	0.4755114922725736	T	T	T
0.6651679696708986	0.3993466103604346	0.5166904009666448	T	T	T
0.7398567615126104	0.7467378077975099	0.4865631207810162	T	T	T
0.9317811917723891	0.9246322375093987	0.5056189653378931	T	T	T
0.2759274815604861	0.4950028680403979	0.4732554256337486	T	T	T
0.3966254464943134	0.1677566764894620	0.5200551994835712	T	T	T
0.8555175975396605	0.3333400213788882	0.5417215321289356	T	T	T
0.8112661083571809	0.3410004034017498	0.4438234431744612	T	T	T
0.7329307097597749	0.9992617259533441	0.4750354837632775	T	T	T
0.9375641406058107	0.6683735855762551	0.5099956596656113	T	T	T
0.5166344834805299	0.7389058080102855	0.4862604397328619	T	T	T
0.1507348070571942	0.9230990674417398	0.5044732725188364	T	T	T
0.2371225384855380	0.2699786946022942	0.4729210560171287	T	T	T
0.4426996302144093	0.3903992797104940	0.5203316288733559	T	T	T
0.4863902115342732	0.5247580065578734	0.4788233909202702	T	T	T
0.1935876320010023	0.1336571159883020	0.5103622918920123	T	T	T
0.6053139113791756	0.0687196285796891	0.5421014701523440	T	T	T
0.0672843725021968	0.6016897377080432	0.4470622603191873	T	T	T
0.0778487082636014	0.8493435310534719	0.5517673352495127	T	T	T
0.5902483183788401	0.8194308271054555	0.4376842534719711	T	T	T
0.8195815907025672	0.5699892591197131	0.5381811994139952	T	T	T
0.8401640749468228	0.0996197165523925	0.4491565767342305	T	T	T
0.9976807582449080	0.4782064106151526	0.4802384583660248	T	T	T
0.6805421568507453	0.1872377585066894	0.5101629026071627	T	T	T
0.3378219175196576	0.5995098267460239	0.5426689955164850	T	T	T
0.3376221271309985	0.0602470924805370	0.4479000427396540	T	T	T
0.0847473586234861	0.0699976611717234	0.5505111505707745	T	T	T
0.5951708042968304	0.5865131262536371	0.4377998147251850	T	T	T
0.6143575198934723	0.8167037482949772	0.5413772995379839	T	T	T
0.0667670968280764	0.8334145511155213	0.4491690311492775	T	T	T
0.5321533245007725	0.9902467689633963	0.4785717001962012	T	T	T
0.1408093583620313	0.6759441712951031	0.5110895507022037	T	T	T
0.0726701952187495	0.3326981232503801	0.5411210555404293	T	T	T
0.6089116027222152	0.3305854152426987	0.4477832316642054	T	T	T
0.8544239151880924	0.0792328753547680	0.5508953719688698	T	T	T
0.8246902956125917	0.5888401377302253	0.4375751304163847	T	T	T
0.5823469692182434	0.5999830751881973	0.5410716703984205	T	T	T
0.1072192463787172	0.0597348763793479	0.4490219044464074	T	T	T
0.9469575155540728	0.6508225730279275	0.5740387802266246	T	T	T

---

**Pt- dimer on Indium Oxide ( In order of increasing energy as shown in the SI)**

Best:

1.0000000000000000  
14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt  
64 96 2

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7544707196023146	0.0070445605655319	0.6435644374896271	T	T	T

0.9047972643992253	0.6551723910194682	0.5921543540923735	T	T	T
0.4288150753530098	0.6779294513329911	0.5831198321638612	T	T	T
0.2485423024657048	0.9758382135542935	0.6505080772091295	T	T	T
0.7394195625487845	0.4948002737742043	0.6503356292684179	T	T	T
0.9279034804990043	0.1799999292014966	0.5831673275412561	T	T	T
0.4022662556098639	0.1558317237547032	0.5920594359739606	T	T	T
0.2649869569814303	0.5146905699679897	0.6417260659382379	T	T	T
0.2422130049818928	0.7542923916722531	0.6428184000146432	T	T	T
0.4406674774626169	0.9048965103991885	0.5920364598177502	T	T	T
0.8919930554972211	0.4302970421541339	0.5829116235749062	T	T	T
0.7710270596906994	0.2466439361396857	0.6508640760455761	T	T	T
0.7653225644063583	0.7383986142744901	0.6499250218745186	T	T	T
0.8909798588039406	0.9281428878516415	0.5828653750260745	T	T	T
0.4411903661822714	0.4037758199367151	0.5920627740702827	T	T	T
0.2204590945301001	0.2645925641390067	0.6418134451050715	T	T	T
0.9999139428287869	0.2513579854791510	0.6415971983511867	T	T	T
0.6546275923806801	0.4402790591641583	0.5921073110551456	T	T	T
0.6782173922875161	0.8935956113512298	0.5831716466297699	T	T	T
0.9752523113485811	0.7804106914216937	0.6504377586388171	T	T	T
0.4992383147800403	0.7634807430532422	0.6497959955639507	T	T	T
0.1806036303895459	0.8911404100342929	0.5829321711160088	T	T	T
0.1550541883558005	0.4415480839318874	0.5921229970676046	T	T	T
0.5147039077984723	0.2209655895888629	0.6411540562878522	T	T	T
0.9995425711507443	-0.0001133342475685	0.6397923438085853	T	T	T
0.6667348005779946	0.6666794813149136	0.5867282576226144	T	T	T
0.9928617052707815	0.4997471975533070	0.6459892565848986	T	T	T
0.6685864674468667	0.1646988434831150	0.5879239468501272	T	T	T
0.4975499427260917	0.5108513785134703	0.6459434814682493	T	T	T
0.1649490113462806	0.1650251581995279	0.5881215938068730	T	T	T
0.5107619111845101	0.9928083077360802	0.6455983250310792	T	T	T
0.1652922069541375	0.6698319868234629	0.5881351384462441	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F

0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8087166971872787	0.8523618337761740	0.6597278247640779	T	T	T
0.8504764462317650	0.8050827745213547	0.5723758973241275	T	T	T
0.2737406965987353	0.7257371483947154	0.5998727364019398	T	T	T
0.3989267429087753	0.9425770080530170	0.6350147252293488	T	T	T
0.7476063393398525	0.5133633638797389	0.6082461617345413	T	T	T
0.9223250948073355	0.1596644315231761	0.6274075280472098	T	T	T
0.4960339992420039	0.2320820133061662	0.5985314210872927	T	T	T
0.1716150889698181	0.4392700377575871	0.6396000055586629	T	T	T
0.3422400082502028	0.8063217767452108	0.6585524898365653	T	T	T

0.3445438881536242	0.8500825128297559	0.5724905265316921	T	T	T
0.9991190860082180	0.2748657567488445	0.5992946173600814	T	T	T
0.6602345774713517	0.3993852026895159	0.6352625063580322	T	T	T
0.7390944935830348	0.7474720690748495	0.6079479022356182	T	T	T
0.9225767104673520	0.9198195344930594	0.6249919053871875	T	T	T
0.2703758367720577	0.4992534646886700	0.5990525513634601	T	T	T
0.3890346561359831	0.1715179005373556	0.6393320761492423	T	T	T
0.8512938072092254	0.3350372010305047	0.6611186498125762	T	T	T
0.8056250381605708	0.3440282847717861	0.5725910252387958	T	T	T
0.7266524182573135	0.9995258878506914	0.6000636533116339	T	T	T
0.9418063233046163	0.6613751325623398	0.6353664283349927	T	T	T
0.5140553857346865	0.7387123318565849	0.6078260148311621	T	T	T
0.1585313865061724	0.9229196480081545	0.6253737434170829	T	T	T
0.2292608454312995	0.2709353918084056	0.5991093923244221	T	T	T
0.4394462275877991	0.3898111282601135	0.6394344127613339	T	T	T
0.4815531824826030	0.5270594769022361	0.6032911672158018	T	T	T
0.1710013192759459	0.1384984059862273	0.6342386714361544	T	T	T
0.5952825699776074	0.0676712159712159	0.6584581631399755	T	T	T
0.0624634380610444	0.6060280529389920	0.5768820881661564	T	T	T
0.9925041284723501	0.8618392667521526	0.6848886410946192	T	T	T
0.5848197201463650	0.8224252180203347	0.5669021425949297	T	T	T
0.8277941527410109	0.5736021288225703	0.6595662815427790	T	T	T
0.8375903959697278	0.1001151745851416	0.5783310989735408	T	T	T
0.9909844371290516	0.4821139239446675	0.6033532574850317	T	T	T
0.6849532227060521	0.1771166330656559	0.6314612077091383	T	T	T
0.3375011894183465	0.5959336981427583	0.6586696483237939	T	T	T
0.3311783046026122	0.0624926143537178	0.5768273703657879	T	T	T
0.1779108039942504	0.9846555283371871	0.6880616731246528	T	T	T
0.5932250319718338	0.5842873098291733	0.5669240237931817	T	T	T
0.5987845787310269	0.8279994225555186	0.6594742489466642	T	T	T
0.0628847090810510	0.8371570995329266	0.5781433455390707	T	T	T
0.5264425363740575	0.9924605471864708	0.6029436370176966	T	T	T
0.1359843773766330	0.6900293878194387	0.6343434618850126	T	T	T
0.0657028418246756	0.3398835688474736	0.6589448452501560	T	T	T
0.6055611787441713	0.3319648694389414	0.5767177940772649	T	T	T
0.7743933283845157	0.1647566868341668	0.6859726782002588	T	T	T
0.8222254736404389	0.5935012492877035	0.5668919602985937	T	T	T
0.5753718840263634	0.5975317437477088	0.6599613132159325	T	T	T
0.0994428933173121	0.0630526176691596	0.5783018992443827	T	T	T
0.0858673261806969	0.9291080701676455	0.6854453008289575	T	T	T

Best+1

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 2

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7504083136881776	0.0012516167830593	0.6415065070808945	T	T	T
0.9055461574748962	0.6542317399339563	0.5928455114346066	T	T	T
0.4255001696020568	0.6794815785021339	0.5836122591016910	T	T	T
0.2431380474370373	0.9862769672655349	0.6511340164370564	T	T	T

0.7352039400986511	0.4997620665927255	0.6497981618466225	T	T	T
0.9290566420964451	0.1785136399362761	0.5824725013795031	T	T	T
0.4061395303932765	0.1531147614119628	0.5920145371639967	T	T	T
0.2647313492080443	0.5118658014902773	0.6409313313453743	T	T	T
0.2280664750602919	0.7613859295094398	0.6450873790380114	T	T	T
0.4399547813912904	0.9039154849838336	0.5921646102593433	T	T	T
0.8917951344528483	0.4303113238594622	0.5833853878022693	T	T	T
0.7860051374177012	0.2408690888146321	0.6491241102463186	T	T	T
0.7660396853911053	0.7420623557834951	0.6506493762386971	T	T	T
0.8918250452571719	0.9299172683693543	0.5832779667911386	T	T	T
0.4417752326099227	0.4018139962842822	0.5919821377942535	T	T	T
0.2289797595446530	0.2557393293877186	0.6422798538129172	T	T	T
0.0054772989494223	0.2319983916162829	0.6391525697692158	T	T	T
0.6537549974430582	0.4407016392086970	0.5923061888148383	T	T	T
0.6787418378673611	0.8911611479440186	0.5828744564502738	T	T	T
0.9841706677221130	0.7806891029166220	0.6483833764526891	T	T	T
0.4892463196887932	0.7690743849771139	0.6505797451014875	T	T	T
0.1778046084644154	0.8937163278653750	0.5841696719925324	T	T	T
0.1544787366627087	0.4394005108720128	0.5925466515999376	T	T	T
0.5174523761004018	0.2188696904717522	0.6417201456975126	T	T	T
0.0019425501666192	0.9958883457809121	0.6466017227088314	T	T	T
0.6654742306031585	0.6670241416172346	0.5872181226906503	T	T	T
0.9921575348660071	0.5039617475220713	0.6484386756048267	T	T	T
0.6698966502075249	0.1650855858108352	0.5879516746002751	T	T	T
0.4946597346071125	0.5111141514019589	0.6457366942577381	T	T	T
0.1683410299217129	0.1644710299940937	0.5870029621802231	T	T	T
0.5109350312380242	0.9904633688830854	0.6457851356988619	T	T	T
0.1675949106208397	0.6671825633962197	0.5879995869877854	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F



0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8182167720331431	0.8521352761546723	0.6613941308115305	T	T	T
0.8509935644154378	0.8054555330902431	0.5727854609830580	T	T	T
0.2707184130457726	0.7296540080500495	0.6010097451980740	T	T	T
0.3982539860180601	0.9411793638365362	0.6353824859009386	T	T	T
0.7452414108046371	0.5143040828729033	0.6079430764210307	T	T	T
0.9241599726492570	0.1491353373888394	0.6238776957728629	T	T	T
0.5009090943031945	0.2293206137857491	0.5990569786898130	T	T	T
0.1723446786184748	0.4318326741424564	0.6387984054078873	T	T	T
0.3289261308728915	0.8190378617314509	0.6616715774853508	T	T	T
0.3426906852888272	0.8506083446521682	0.5725976361369530	T	T	T
0.0013610329543771	0.2746141478443612	0.5982913353021101	T	T	T
0.6589965392375046	0.3967387561094132	0.6359077160409781	T	T	T

0.7393878897126258	0.7476717268122506	0.6084789096293481	T	T	T
0.9135049408228814	0.9328251130753568	0.6264234760568136	T	T	T
0.2726543250043146	0.4936260219436258	0.5983020521012845	T	T	T
0.3969183107522468	0.1658601826981098	0.6385287911800793	T	T	T
0.8546007754884234	0.3409916925468366	0.6567776507523461	T	T	T
0.8049428132634586	0.3448087086574662	0.5725321393087860	T	T	T
0.7238093945398489	0.0005783351489867	0.5992471984550224	T	T	T
0.9406763041962247	0.6642400556424589	0.6359815643126938	T	T	T
0.5119437740293011	0.7397353010172150	0.6085122885773542	T	T	T
0.1550428054515676	0.9298793873482798	0.6270038680928881	T	T	T
0.2346509318406211	0.2689929510942909	0.5991806974176527	T	T	T
0.4391049457411028	0.3880546901562696	0.6397888935153458	T	T	T
0.4800796967718732	0.5262409456085201	0.6030966719318729	T	T	T
0.1790769310731065	0.1366369074961551	0.6290278800354558	T	T	T
0.5973282346752969	0.0643141083913313	0.6593109383101837	T	T	T
0.0622812341632687	0.6032333237987241	0.5767937650345566	T	T	T
0.0751637429212964	0.8425521511786916	0.6661300729109294	T	T	T
0.5851513814839309	0.8208833937120014	0.5669122143997525	T	T	T
0.8226692509150946	0.5786778967917073	0.6592974971176098	T	T	T
0.8354766305165505	0.1006899710371574	0.5775657648373913	T	T	T
0.9902550396454221	0.4804081852533130	0.6055555751710033	T	T	T
0.6906006033605057	0.1727107243807472	0.6345640226142359	T	T	T
0.3341016503387575	0.5978493831574765	0.6581154757443234	T	T	T
0.3354535123763951	0.0604420223184377	0.5760802806128927	T	T	T
0.1844463921949079	0.0909369578037546	0.6862838169911611	T	T	T
0.5906302411547241	0.5859514641064503	0.5672600459006667	T	T	T
0.5981924402449854	0.8272896000309876	0.6598397796049750	T	T	T
0.0622619339502495	0.8368176309777591	0.5784730973284451	T	T	T
0.5282478859532838	0.9890297963759205	0.6031986665425779	T	T	T
0.1391862707596971	0.6742239001700303	0.6308964007519478	T	T	T
0.0491283595162089	0.4020290114699488	0.6819526849282137	T	T	T
0.6061436185695689	0.3313932710823648	0.5768226017087490	T	T	T
0.8962214620706817	0.1168138599888459	0.6772023393386174	T	T	T
0.8229121040306275	0.5932139911817902	0.5672601809710648	T	T	T
0.5697890811978760	0.6006284274756795	0.6593030242525473	T	T	T
0.1008500191396297	0.0630187803548278	0.5774991504833283	T	T	T
0.1091373767756138	0.2521133181066017	0.6809136954638830	T	T	T

Best+2

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 37.0694492725965290

In O Pt

64 96 2

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.6431398506393720	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.6539230732949477	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.6539230770028368	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.6431398543472753	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.6431398506393720	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.6539230732949477	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.6539230770028368	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.6431398543472753	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.6431398506393720	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.6539230732949477	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.6539230770028368	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.6431398543472753	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.6485314633374628	F	F	F
0.999999846666654	0.5000000076666637	0.6485314707532766	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.6485314707532766	F	F	F
0.5000000076666637	0.999999846666654	0.6485314707532766	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.7350233487032511	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.7238134637074225	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.7231766407604923	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.7348280063813135	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.7350233487032511	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.7238134637074225	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.7231766407604923	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.7348280063813135	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.7350233487032511	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.7238134637074225	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.7231766407604923	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.7348280063813135	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7296101269241859	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.7290350533343641	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.7290350533343641	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.7290350533343641	F	F	F
0.7567783021216402	0.0141635649125877	0.8879282921078564	T	T	T
0.9058191499910352	0.6555590147039829	0.8154267617801993	T	T	T
0.4274925934457136	0.6796794905502040	0.8037400104710657	T	T	T
0.2537019278449346	0.9788683556174954	0.8956026429805133	T	T	T
0.7399492871544224	0.4953529365223711	0.8954413975424722	T	T	T
0.9292260737523362	0.1779675808177130	0.8044394353183921	T	T	T
0.4014215148594864	0.1558449014407075	0.8154682083526960	T	T	T

0.2664859987675509	0.5130181359100680	0.8822475838775566	T	T	T
0.2337152749834638	0.7576059793475505	0.8874643630890405	T	T	T
0.4418571445805652	0.9047163831547247	0.8151573462095862	T	T	T
0.8938503335183914	0.4277900915620650	0.8036765468510905	T	T	T
0.7750745776699896	0.2435392819693099	0.8924393731721452	T	T	T
0.7720355628518569	0.7418537193712215	0.8956294676437103	T	T	T
0.8916364304738413	0.9317395344264400	0.8043024040932970	T	T	T
0.4426622364503662	0.4025915868488167	0.8153331280348671	T	T	T
0.2195956563771011	0.2634219782227034	0.8831832480541497	T	T	T
0.0060403303144622	0.2369061047771087	0.8870959602187857	T	T	T
0.6545349044688615	0.4408448842401884	0.8151435113721940	T	T	T
0.6798971011584303	0.8938401367210279	0.8036983319423361	T	T	T
0.9862860638560809	0.7814895460063910	0.8921538358441592	T	T	T
0.4976899645046773	0.7658516728806452	0.8955002194120447	T	T	T
0.1791559252857438	0.8929093846161182	0.8043991166652182	T	T	T
0.1556733873096670	0.4418601664578664	0.8154802179123188	T	T	T
0.5130951143350724	0.2210112505523662	0.8822985950160266	T	T	T
0.0128092691667979	0.9911309446040935	0.8915524625844474	T	T	T
0.6677492890086525	0.6667731560436625	0.8088921522671784	T	T	T
0.9936771448720115	0.4987104808764518	0.8890766841842808	T	T	T
0.6672870204905466	0.1644525416855187	0.8093894498526664	T	T	T
0.4961312336538503	0.5129463038291052	0.8890369999728834	T	T	T
0.1642576537650412	0.1660845921673537	0.8100692690165651	T	T	T
0.5144433671416654	0.9916920578872219	0.8889521106668850	T	T	T
0.1679093355468005	0.6679786947397863	0.8095417860712197	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.6698389998717786	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.6317936634980370	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.6201344043196073	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.6343672786746026	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.6698389998717786	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.6317936634980370	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.6201344043196073	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.6343672786746026	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.6698389998717786	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.6317936634980370	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.6201344043196073	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.6343672786746026	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.6272239192261537	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.6652692555998811	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.6769285131661888	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.6626956404233155	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.6272239192261537	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.6652692555998811	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.6769285131661888	F	F	F

0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.6626956404233155	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.6272239192261537	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.6652692555998811	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.6769285131661888	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.6626956404233155	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.7078025792003189	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.7456345240831368	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.7578578546631292	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.7434497094289867	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.7078025792003189	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.7456345240831368	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.7578578546631292	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.7434497094289867	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.7078025792003189	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.7456345240831368	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.7578578546631292	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.7434497094289867	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.7506555534619963	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.7124385789076726	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.7007492326504874	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.7147941909331479	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.7506555534619963	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.7124385789076726	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.7007492326504874	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.7147941909331479	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.7506555534619963	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.7124385789076726	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.7007492326504874	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.7147941909331479	F	F	F
0.8216684199427359	0.8539825968960270	0.9099159216686334	T	T	T
0.8515471431769399	0.8066955821314745	0.7886391145931245	T	T	T
0.2728279885689363	0.7282481528882186	0.8269939361594394	T	T	T
0.4055714081517658	0.9389483528147184	0.8742265141768795	T	T	T
0.7479524751327923	0.5132370770060517	0.8376250273349130	T	T	T
0.9251540775529145	0.1497088551583941	0.8634871743487380	T	T	T
0.4946610529796648	0.2323519236556065	0.8236920182158584	T	T	T
0.1727427355843801	0.4374520824913907	0.8805215512175534	T	T	T
0.3389307083028112	0.8103386769001166	0.9085529820865327	T	T	T
0.3446614477459236	0.8505959550143706	0.7884087017582960	T	T	T
0.9985481054841928	0.2736420181730811	0.8273118516356028	T	T	T
0.6580912471804083	0.4001403784372292	0.8742371622932611	T	T	T
0.7407244204603239	0.7480692816007440	0.8379522720137821	T	T	T
0.9183806551421172	0.9351226201237891	0.8632670998058047	T	T	T
0.2733608173649789	0.4944271403518488	0.8234951539080011	T	T	T

0.3895576964109894	0.1712045169369114	0.8803229198178733	T	T	T
0.8479131955154792	0.3355146110864695	0.9092149440604886	T	T	T
0.8061224167923052	0.3436800025385852	0.7886114415883395	T	T	T
0.7273956165656464	-0.0003418327224942	0.8272548687971860	T	T	T
0.9437120813211386	0.6626242490512806	0.8747713638477290	T	T	T
0.5146751082520327	0.7387159790338881	0.8376087617362644	T	T	T
0.1612408527992589	0.9270346385832996	0.8628351197943809	T	T	T
0.2303783609953618	0.2722296158304058	0.8243346430032422	T	T	T
0.4392644986918037	0.3896349402082010	0.8803432420273900	T	T	T
0.4807281246603534	0.5273574525491141	0.8304598561486471	T	T	T
0.1802519094846177	0.1377036576571196	0.8693371391933880	T	T	T
0.5971988285565499	0.0679646153439105	0.9069513038781762	T	T	T
0.0624983367181867	0.6055939142595456	0.7936937310474911	T	T	T
0.0845723096621966	0.8345102762913433	0.9169100027247978	T	T	T
0.5865972975380344	0.8221922239643112	0.7811161594973799	T	T	T
0.8288308814320325	0.5754900185897931	0.9074428016131764	T	T	T
0.8352667495937337	0.1023049799909496	0.7957642963342366	T	T	T
0.9923021217304846	0.4822675070027033	0.8306555042552007	T	T	T
0.6766560865093706	0.1846970892721512	0.8678104047350909	T	T	T
0.3369022769249641	0.5960014856442005	0.9068433993602376	T	T	T
0.3321757116726805	0.0619325889159539	0.7939761699495769	T	T	T
0.2205433035045509	0.0532044115376150	0.9488691191551308	T	T	T
0.5927096178266287	0.5857436520387493	0.7809972580196154	T	T	T
0.6039704990254481	0.8267412889428046	0.9076876645957032	T	T	T
0.0623850281431977	0.8375290623754458	0.7966868718575171	T	T	T
0.5274407423127682	0.9935449637791898	0.8302835475336721	T	T	T
0.1403789486288187	0.6736172373514783	0.8678424445981796	T	T	T
0.0649163454251697	0.3390887625717769	0.9065102344238314	T	T	T
0.6055852030194766	0.3325255072954721	0.7937224340995118	T	T	T
0.7860993433644373	0.1209957712423644	0.9291461138287807	T	T	T
0.8228967706059348	0.5927670112132266	0.7811355996620342	T	T	T
0.5752138292579170	0.5986052380958981	0.9083214198403441	T	T	T
0.1001079762695842	0.0631669492187278	0.7957696641750089	T	T	T
0.0766336887304441	0.0932829050695970	0.9427985841090499	T	T	T
0.9189957165089500	0.0791950741243674	0.9534374048241716	T	T	T

Best + 3

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 37.0694492725965290

In O Pt

## Selective dynamics

## Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.6431398506393720	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.6539230732949477	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.6539230770028368	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.6431398543472753	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.6431398506393720	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.6539230732949477	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.6539230770028368	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.6431398543472753	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.6431398506393720	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.6539230732949477	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.6539230770028368	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.6431398543472753	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.6485314633374628	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.6485314707532766	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.6485314707532766	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.6485314707532766	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.7350233487032511	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.7238134637074225	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.7231766407604923	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.7348280063813135	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.7350233487032511	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.7238134637074225	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.7231766407604923	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.7348280063813135	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.7350233487032511	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.7238134637074225	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.7231766407604923	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.7348280063813135	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7296101269241859	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.7290350533343641	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.7290350533343641	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.7290350533343641	F	F	F
0.7583467922487357	0.0081172831061099	0.8872180212876030	T	T	T
0.9051109080285460	0.6558938976883597	0.8154261511099867	T	T	T
0.4263570929128944	0.6795100732231363	0.8040829563187599	T	T	T
0.2459510215260349	0.9781819737607453	0.8941274754774824	T	T	T
0.7317736406071984	0.5048936417594742	0.8957853850456924	T	T	T
0.9277930157066825	0.1786111094247445	0.8046751989660109	T	T	T
0.4012007196028533	0.1555447102454676	0.8152441218396407	T	T	T
0.2664259322426315	0.5143263761380558	0.8823005969351141	T	T	T
0.2254982178373337	0.7613067686188651	0.8884962737876735	T	T	T

0.4402155344614129	0.9047822109918608	0.8151770211633785	T	T	T
0.8930949502183008	0.4286874005778473	0.8034708739391903	T	T	T
0.7724235978200342	0.2294683315242937	0.8952986300299657	T	T	T
0.7686072137397296	0.7432042574266752	0.8954097346685185	T	T	T
0.8921181272500934	0.9301386614080032	0.8039539444280434	T	T	T
0.4425718075065075	0.4026761500797486	0.8154248017675602	T	T	T
0.2202577484574185	0.2658258078856852	0.8823002156064119	T	T	T
0.0096572315160390	0.2366443313183375	0.8852531591792185	T	T	T
0.6557676378380684	0.4392552374830551	0.8162969531476925	T	T	T
0.6788247398485375	0.8940356117689255	0.8036262623564664	T	T	T
0.9843490346376830	0.7803621104561363	0.8925419734759328	T	T	T
0.4920556805581972	0.7687853916487277	0.8952160113279999	T	T	T
0.1761534690493616	0.8941428197213197	0.8053406122867710	T	T	T
0.1553389341404931	0.4430722481813992	0.8154839432888640	T	T	T
0.5112193567651189	0.2202652027581972	0.8823365004732243	T	T	T
0.9941583919813173	-0.0017146611599264	0.8960579895380041	T	T	T
0.6662199597476633	0.6672080460885913	0.8085766243665446	T	T	T
0.9913649442317745	0.4998145796498855	0.8889133991440503	T	T	T
0.6667188985002709	0.1643793795819097	0.8095303626335918	T	T	T
0.4964163639551206	0.5108075772263616	0.8899563163511504	T	T	T
0.1644584311965089	0.1660769067382879	0.8097613495515998	T	T	T
0.5121938440627942	0.9914035974612034	0.8889693020870351	T	T	T
0.1674256413272447	0.6690697556624359	0.8096415014866666	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.6698389998717786	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.6317936634980370	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.6201344043196073	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.6343672786746026	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.6698389998717786	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.6317936634980370	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.6201344043196073	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.6343672786746026	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.6698389998717786	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.6317936634980370	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.6201344043196073	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.6343672786746026	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.6272239192261537	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.6652692555998811	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.6769285131661888	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.6626956404233155	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.6272239192261537	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.6652692555998811	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.6769285131661888	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.6626956404233155	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.6272239192261537	F	F	F



0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.6652692555998811	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.6769285131661888	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.6626956404233155	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.7078025792003189	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.7456345240831368	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.7578578546631292	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.7434497094289867	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.7078025792003189	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.7456345240831368	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.7578578546631292	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.7434497094289867	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.7078025792003189	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.7456345240831368	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.7578578546631292	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.7434497094289867	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.7506555534619963	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.7124385789076726	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.7007492326504874	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.7147941909331479	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.7506555534619963	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.7124385789076726	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.7007492326504874	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.7147941909331479	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.7506555534619963	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.7124385789076726	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.7007492326504874	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.7147941909331479	F	F	F
0.8194833184471516	0.8510066089834695	0.9105832603999054	T	T	T
0.8503152479931243	0.8062398467646065	0.7883512383944689	T	T	T
0.2718671764502967	0.7295036229473512	0.8276013593262317	T	T	T
0.4001086316785929	0.9416117887252499	0.8742623519389295	T	T	T
0.7469212905603918	0.5137752098921083	0.8380931012260410	T	T	T
0.9185724405516280	0.1623024153878072	0.8636079451213673	T	T	T
0.4927460445617567	0.2333379143197359	0.8235051586212901	T	T	T
0.1727408317041786	0.4388780047817403	0.8798821449939457	T	T	T
0.3345701137094551	0.8105594378398326	0.9071677974986334	T	T	T
0.3425265395319252	0.8511728408590273	0.7887226930718781	T	T	T
-0.0007275239414210	0.2746896210903640	0.8264992714502322	T	T	T
0.6660667113194053	0.3971670177506720	0.8776769879840811	T	T	T
0.7393873816670760	0.7481718420025539	0.8376125410830016	T	T	T
0.9227311214669791	0.9249494499312523	0.8610147112242018	T	T	T
0.2734920219131635	0.4960234669768153	0.8234389976514686	T	T	T
0.3886864677037996	0.1713346718843602	0.8802496229889345	T	T	T
0.8651627580554868	0.3643330260018492	0.9167931108658076	T	T	T

0.8055262018456099	0.3444092980600854	0.7886205501925448	T	T	T
0.7260752713128320	-0.0000031456224479	0.8269514518202792	T	T	T
0.9430511436061478	0.6619543139101912	0.8745361597616206	T	T	T
0.5137382511566843	0.7388490109725246	0.8375988750974979	T	T	T
0.1468893666013607	0.9312906987108894	0.8642601622396282	T	T	T
0.2299447127329992	0.2726842598756329	0.8236776360605489	T	T	T
0.4392350703510561	0.3894558778773602	0.8807814770278147	T	T	T
0.4832639936611511	0.5256396502522602	0.8313604531632061	T	T	T
0.1812652192960649	0.1375535142680163	0.8695013222987521	T	T	T
0.5960960534716434	0.0663613086237386	0.9067232454054737	T	T	T
0.0621741051804059	0.6060589981267881	0.7936789324600376	T	T	T
0.0765943654231784	0.8380331937098798	0.9190793851104462	T	T	T
0.5854485209625452	0.8224933862651533	0.7809794450750688	T	T	T
0.8257024091723648	0.5789545343291806	0.9072642996586470	T	T	T
0.8349913430706720	0.1018856591518505	0.7959406411496540	T	T	T
0.9914288796513605	0.4827743031476286	0.8304927177883629	T	T	T
0.6710446471470723	0.1852109074567864	0.8682157447144728	T	T	T
0.3356145027266553	0.5974124644741010	0.9069558347579183	T	T	T
0.3314875903182966	0.0621671296784152	0.7937769746935018	T	T	T
0.1878264169819772	0.0266020242027008	0.9476891007485522	T	T	T
0.5918910139427179	0.5851752359030470	0.7813249016034316	T	T	T
0.5999124192043886	0.8271823532202564	0.9077548623133801	T	T	T
0.0630481349555921	0.8364680590585515	0.7957021966508321	T	T	T
0.5257719046923301	0.9927938405271359	0.8303045506522969	T	T	T
0.1397061220052385	0.6749900440494080	0.8682560687865436	T	T	T
0.0672044455142700	0.3396308611592680	0.9055619377986523	T	T	T
0.6057269632684713	0.3325318805527233	0.7940919190572562	T	T	T
0.8354435033563559	0.0736709924516080	0.9190531169888966	T	T	T
0.8216496334727122	0.5928799766520123	0.7810820849526410	T	T	T
0.5691320231059362	0.6023049073808272	0.9091806799593563	T	T	T
0.0991852392451283	0.0638815553411554	0.7960329004858251	T	T	T
0.0397335306896175	0.1175775668825870	0.9437747650716598	T	T	T
0.8558515796632412	0.2708395993759817	0.9515673074900680	T	T	T

Best + 4

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 37.0694492725965290

In O Pt

64 96 2

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.6431398506393720	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.6539230732949477	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.6539230770028368	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.6431398543472753	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.6431398506393720	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.6539230732949477	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.6539230770028368	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.6431398543472753	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.6431398506393720	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.6539230732949477	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.6539230770028368	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.6431398543472753	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.6485314633374628	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.6485314707532766	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.6485314707532766	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.6485314707532766	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.7350233487032511	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.7238134637074225	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.7231766407604923	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.7348280063813135	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.7350233487032511	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.7238134637074225	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.7231766407604923	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.7348280063813135	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.7350233487032511	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.7238134637074225	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.7231766407604923	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.7348280063813135	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7296101269241859	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.7290350533343641	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.7290350533343641	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.7290350533343641	F	F	F
0.7523151156239178	0.0113137647510428	0.8869589917918276	T	T	T
0.9046388296604151	0.6552771291715328	0.8155251341445088	T	T	T
0.4282376732844665	0.6775451453610775	0.8038771973485052	T	T	T
0.2464479694297225	0.9792391588032435	0.8932899887256005	T	T	T
0.7414234442136031	0.4875389017947699	0.8965202353845105	T	T	T
0.9286563784292909	0.1814729594377270	0.8035188097327687	T	T	T
0.4007913434438577	0.1560492111972895	0.8154568849126655	T	T	T
0.2647153336421509	0.5171982895635195	0.8839028817829061	T	T	T
0.2357806191049792	0.7591712950298323	0.8915527623874975	T	T	T
0.4408397133837151	0.9048616431371658	0.8152103456532586	T	T	T
0.8941240693278846	0.4275604469104758	0.8039127743213431	T	T	T

0.7782531092512573	0.2325312010869539	0.8960806482310256	T	T	T
0.7661274766950644	0.7386210217556367	0.8958916012365733	T	T	T
0.8890352763458640	0.9296267663044658	0.8023664102935740	T	T	T
0.4412645337352344	0.4039217754305164	0.8155767751684746	T	T	T
0.2185408823933724	0.2670109155528416	0.8829420674989868	T	T	T
0.0089018851093849	0.2372320327993766	0.8908440572687625	T	T	T
0.6557240238338859	0.4388085790112560	0.8163360143969624	T	T	T
0.6778733075825810	0.8936599367195041	0.8036334120992265	T	T	T
0.9760634799095055	0.7813937071522634	0.8948978211477656	T	T	T
0.4980516753742796	0.7639107548815720	0.8955382355894065	T	T	T
0.1824549532465024	0.8883948863011847	0.8027478683283837	T	T	T
0.1556374069977085	0.4434789289155694	0.8155993315931630	T	T	T
0.5106115933534218	0.2223895248206528	0.8828957619019647	T	T	T
0.0018625617104938	-0.0012596569094935	0.8774383354858388	T	T	T
0.6671083808516841	0.6654073673623511	0.8090906175140150	T	T	T
0.9917284635686731	0.5001214828508282	0.8891253778174066	T	T	T
0.6670978605305654	0.1659394984511193	0.8097835255652610	T	T	T
0.4984518361341262	0.5091543460948844	0.8898868755642386	T	T	T
0.1626417547893625	0.1670904234247809	0.8102184826258606	T	T	T
0.5108189112793802	0.9926397634104090	0.8891623889671063	T	T	T
0.1669051162653416	0.6709845031876041	0.8105754863586226	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.6698389998717786	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.6317936634980370	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.6201344043196073	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.6343672786746026	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.6698389998717786	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.6317936634980370	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.6201344043196073	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.6343672786746026	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.6698389998717786	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.6317936634980370	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.6201344043196073	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.6343672786746026	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.6272239192261537	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.6652692555998811	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.6769285131661888	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.6626956404233155	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.6272239192261537	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.6652692555998811	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.6769285131661888	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.6626956404233155	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.6272239192261537	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.6652692555998811	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.6769285131661888	F	F	F

0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.6626956404233155	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.7078025792003189	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.7456345240831368	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.7578578546631292	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.7434497094289867	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.7078025792003189	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.7456345240831368	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.7578578546631292	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.7434497094289867	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.7078025792003189	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.7456345240831368	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.7578578546631292	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.7434497094289867	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.7506555534619963	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.7124385789076726	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.7007492326504874	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.7147941909331479	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.7506555534619963	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.7124385789076726	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.7007492326504874	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.7147941909331479	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.7506555534619963	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.7124385789076726	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.7007492326504874	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.7147941909331479	F	F	F
0.8101308327857126	0.8546681095482904	0.9102582925985550	T	T	T
0.8495603575362634	0.8054012138289334	0.7883342628569123	T	T	T
0.2749272041939994	0.7251557131995536	0.8276127915678735	T	T	T
0.3999634428936619	0.9418445537562825	0.8742340829965649	T	T	T
0.7484647927898500	0.5109975108552643	0.8386888467938624	T	T	T
0.9228514999574985	0.1587992518762631	0.8630180875568501	T	T	T
0.4939490622051073	0.2333473756966700	0.8241645108670216	T	T	T
0.1716507476297464	0.4411012341712334	0.8806604774414872	T	T	T
0.3397046827171993	0.8136573189453020	0.9096115773785151	T	T	T
0.3454426636786163	0.8495812633160033	0.7883400144256164	T	T	T
-0.0014910419959030	0.2743534825623347	0.8281675756934024	T	T	T
0.6618466957440521	0.3931808916542950	0.8762703979892771	T	T	T
0.7391606600203926	0.7473343562802612	0.8380173041464259	T	T	T
0.9187069844670467	0.9214218642528216	0.8594166067754453	T	T	T
0.2712065569970895	0.5000534770166808	0.8251969796281988	T	T	T
0.3873810925525010	0.1724733458838778	0.8804528155658188	T	T	T
0.8489868917606902	0.3264931375490255	0.9129959244718532	T	T	T
0.8053514282233246	0.3444883226605002	0.7884259867773680	T	T	T
0.7240815208344673	0.0016695217755928	0.8266494962088410	T	T	T

0.9397638250415694	0.6629811131177368	0.8753139917205059	T	T	T
0.5138204853680789	0.7389048802737875	0.8377791000248748	T	T	T
0.1617002762513008	0.9175446379067727	0.8604757734763283	T	T	T
0.2292041882002621	0.2732528762599658	0.8243289416999662	T	T	T
0.4374580923054479	0.3907768270677744	0.8811207601940081	T	T	T
0.4830653110719185	0.5252427014892754	0.8313088515490206	T	T	T
0.1785821516297998	0.1382669562730504	0.8701844157248595	T	T	T
0.5929019478969615	0.0693754479389836	0.9072176237342320	T	T	T
0.0626269402129093	0.6080026792783507	0.7947938719346302	T	T	T
0.1291178298578779	0.8499772002581842	0.9405092696675930	T	T	T
0.5857315324880256	0.8216022104472148	0.7811737995919044	T	T	T
0.8271620636489287	0.5718847749053473	0.9078355605332119	T	T	T
0.8364194868469952	0.1019707933725943	0.7965776816672974	T	T	T
0.9923354281322115	0.4827100868304585	0.8306516828547209	T	T	T
0.6764984258608658	0.1839166821951975	0.8696198434882555	T	T	T
0.3386370148712247	0.5964615016643841	0.9080731203114090	T	T	T
0.3303944489899273	0.0624952015016256	0.7942216628306795	T	T	T
0.0813731309515779	0.1437709874800126	0.9409286045495205	T	T	T
0.5929950557096930	0.5842224459419917	0.7813995187972094	T	T	T
0.5989990375779020	0.8278576562479342	0.9085472843465321	T	T	T
0.0624056882434857	0.8374247320865161	0.7961987451921622	T	T	T
0.5256951134817077	0.9932114044842715	0.8305435255202562	T	T	T
0.1365378307406609	0.6892867758277935	0.8736155073344285	T	T	T
0.0652290852010692	0.3422582855054323	0.9069602532851506	T	T	T
0.6052951168314040	0.3324839740806297	0.7941116357978529	T	T	T
0.8234163164370667	0.0748106898408543	0.9246570693357153	T	T	T
0.8222899527562004	0.5920194419760452	0.7813600602230037	T	T	T
0.5758913347437550	0.5965307140089167	0.9084489711242937	T	T	T
0.0996764715389905	0.0620438606359653	0.7964629182991203	T	T	T
0.0952999467109331	0.0089891305276009	0.9408202073162502	T	T	T
0.9667813779783742	0.9403311335013601	0.9384327376339370	T	T	T

**Pt- trimer on Indium Oxide ( In order of increasing energy as shown in the SI)**

Best :

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7616698150185117	0.0161615786620226	0.6440385786489505	T	T	T
0.9049817687171672	0.6550783092536046	0.5923878260921605	T	T	T
0.4270904468248111	0.6774714349035180	0.5841237870995737	T	T	T
0.2306674940647174	0.9846701341737465	0.6476898346588363	T	T	T
0.7482617368369660	0.4715967744032575	0.6506255626548321	T	T	T
0.9308285344680544	0.1774272655465022	0.5836094047816007	T	T	T
0.4030510733847733	0.1546328918317853	0.5918269861636529	T	T	T
0.2637313209188862	0.5164407016456208	0.6400991516074177	T	T	T
0.2218143548259540	0.7617830727988698	0.6440560141922448	T	T	T
0.4398749782819495	0.9049987559541464	0.5923835784900542	T	T	T

0.8953982230981293	0.4270965147539916	0.5841283185471569	T	T	T
0.7843844117545294	0.2307291312464654	0.6476737054186106	T	T	T
0.7798963621573836	0.7483289738329443	0.6506417730442023	T	T	T
0.8916304422258170	0.9308715798803545	0.5836082846522255	T	T	T
0.4421435650192344	0.4031702676590096	0.5918328408840725	T	T	T
0.2195296913853792	0.2638375218138828	0.6400946821171937	T	T	T
0.0161013194554074	0.2219544635223914	0.6440561775578362	T	T	T
0.6550176314794615	0.4398984238827586	0.5924004348807306	T	T	T
0.6774414338979386	0.8954106918163951	0.5841238857289329	T	T	T
0.9845602507344853	0.7844924226080342	0.6477112029805103	T	T	T
0.4714948323797488	0.7799278760519289	0.6506063180942376	T	T	T
0.1773617348188708	0.8916063614543902	0.5836100830768728	T	T	T
0.1545092414983928	0.4421504386593109	0.5918278062977640	T	T	T
0.5163034618386283	0.2196418927563527	0.6400769258775364	T	T	T
0.9998426934259381	0.9999543891046370	0.6504103511387234	T	T	T
0.6666626894148920	0.6666521147798836	0.5887430230622068	T	T	T
0.0094700439889817	0.4964719275737622	0.6481575955427401	T	T	T
0.6681442846917992	0.1651413715077574	0.5873670451771910	T	T	T
0.4961840744064939	0.4940740826365675	0.6481401988890978	T	T	T
0.1650889141617797	0.1665409322972381	0.5873890925046524	T	T	T
0.4938792806107514	0.0095120903290560	0.6481179330007822	T	T	T
0.1665714591168318	0.6681480187473172	0.5873789132139127	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F



0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8226269474467631	0.8605874186947365	0.6612646520848494	T	T	T
0.8489321661318472	0.8053506771500867	0.5724766609985861	T	T	T
0.2727590099582747	0.7258803601626678	0.5997979868791466	T	T	T
0.3949676289537705	0.9412520005324660	0.6347506580351692	T	T	T
0.7500389579982664	0.5125286413877139	0.6098430509751068	T	T	T
0.9281577975910814	0.1486381414657447	0.6247040953409085	T	T	T
0.4943844485162540	0.2328071538101983	0.5975115587076755	T	T	T
0.1768650234945511	0.4356287093483486	0.6391544837560807	T	T	T
0.3164359473620068	0.8228553874323954	0.6612401791103303	T	T	T
0.3455994803154631	0.8489782457225191	0.5724921716976010	T	T	T
0.0011441127971982	0.2728156923973342	0.5998599053777638	T	T	T
0.6635372528360362	0.3950441973912645	0.6347837348417512	T	T	T
0.7374168131365457	0.7500376004928623	0.6098408828408046	T	T	T
0.9229386905636251	0.9281621371658030	0.6247259075079298	T	T	T
0.2726297716118668	0.4944344537682963	0.5975351397445420	T	T	T
0.3872847787607367	0.1769238271231148	0.6391049328877961	T	T	T
0.8604299495492502	0.3164862349465944	0.6612548043568102	T	T	T
0.8053427245412954	0.3456799150769000	0.5724785574131247	T	T	T

0.7259179280837009	0.0012177696636123	0.5998137272033034	T	T	T
0.9412092693904539	0.6637094293634817	0.6347607686642716	T	T	T
0.5125155512250927	0.7374323057007248	0.6098346316695502	T	T	T
0.1486377000308877	0.9229785591690521	0.6247171913960914	T	T	T
0.2324595593678944	0.2726375782091928	0.5975339543592277	T	T	T
0.4355417467877515	0.3873741315324689	0.6391578495572415	T	T	T
0.4834839960085419	0.5246624347279202	0.6048534919155539	T	T	T
0.1887472009745967	0.1356047545065764	0.6295229490884220	T	T	T
0.5999109079302966	0.0676525737684802	0.6565333899208482	T	T	T
0.0613041511742377	0.6047387672643179	0.5759417349300023	T	T	T
0.0764010301334327	0.8399741619931327	0.6670988735684772	T	T	T
0.5862673463763242	0.8216747636490437	0.5676079338047378	T	T	T
0.9310007633756532	0.5562184635508113	0.6846988348389421	T	T	T
0.8350198507952319	0.1026387158653562	0.5770909002879425	T	T	T
0.9916283223671145	0.4836402044402855	0.6048778100650779	T	T	T
0.6752482654961421	0.1887988456080746	0.6294780441883745	T	T	T
0.3320049463143707	0.6000613657809961	0.6565770583787713	T	T	T
0.3337978729489787	0.0613078345448481	0.5759603800679424	T	T	T
0.0832263468649664	0.0765228739404529	0.6670647933073635	T	T	T
0.5920483464202111	0.5862537100060473	0.5676187189899762	T	T	T
0.5126761669831063	0.9311849905760052	0.6846946143577415	T	T	T
0.0621694678559182	0.8349592607532282	0.5770801311672298	T	T	T
0.5245755394789512	0.9917827346906746	0.6048195473939052	T	T	T
0.1355620243224400	0.6754109114345038	0.6295008385803543	T	T	T
0.0676392533642197	0.3322816693306242	0.6565840895896669	T	T	T
0.6047824482111910	0.3338466084920703	0.5759585529968303	T	T	T
0.8398435201935375	0.0834238912003519	0.6670997540634823	T	T	T
0.8216732613900982	0.5920256173911704	0.5676060334662365	T	T	T
0.5544280227782256	0.5134611554534317	0.6848145534600105	T	T	T
0.1025841696495352	0.0622264175106839	0.5771123152382167	T	T	T
0.7847510918552222	0.5964101610035805	0.6812543145768103	T	T	T
0.5961183379723030	0.6183287245893597	0.6812199385108136	T	T	T
0.6183068263600702	0.7848700176589367	0.6812110702915046	T	T	T

Best + 1

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7597069730990487	0.0129207074055147	0.6455904169299923	T	T	T
0.9037026350936048	0.6555571043914565	0.5917378582742319	T	T	T
0.4295682817464156	0.6782026300386580	0.5835573768676117	T	T	T
0.2272324917016643	0.9962803657806265	0.6494465648735985	T	T	T
0.7491433121011728	0.4867624697555160	0.6499975163719984	T	T	T
0.9289108350135937	0.1781517429117668	0.5836499384023204	T	T	T
0.4016697031656988	0.1547870456240355	0.5919308492336601	T	T	T
0.2580106718259229	0.5131572463977884	0.6421558170554610	T	T	T
0.2175597757819323	0.7650362928793545	0.6385218716172203	T	T	T
0.4389168446945740	0.9042138386685452	0.5929481892418028	T	T	T
0.8925958174113187	0.4277005743703408	0.5831472142114766	T	T	T

0.7773567927712700	0.2369681006331361	0.6477687891064438	T	T	T
0.7690006844664257	0.7403480515858238	0.6501549470577347	T	T	T
0.8942462951601328	0.9293464615560068	0.5850965772692596	T	T	T
0.4408504191099255	0.4040222274316424	0.5924386402431681	T	T	T
0.2177424095695003	0.2671379326822834	0.6404724130625307	T	T	T
0.0074045498186684	0.2323939785103357	0.6437879559069560	T	T	T
0.6546711810992446	0.4396633718934020	0.5922180887518266	T	T	T
0.6788493659436384	0.8943105353700963	0.5838408011487582	T	T	T
0.9805409171204179	0.7727038182230599	0.6510619526093712	T	T	T
0.5055296390346415	0.7627338515445783	0.6522803146812628	T	T	T
0.1764636119398175	0.8947687149450675	0.5830466350122148	T	T	T
0.1539944698330910	0.4420094180856485	0.5917894155354190	T	T	T
0.5102289009250607	0.2230977910691453	0.6409772756804950	T	T	T
0.9922826444369089	0.0113583376587740	0.6517169252537915	T	T	T
0.6659418770289175	0.6673962463347960	0.5875384753017275	T	T	T
0.9912736757859538	0.4966827934498298	0.6450888997554721	T	T	T
0.6672838913855498	0.1642569775950875	0.5879932593755526	T	T	T
0.5048933320427316	0.5084843230487892	0.6470868436035573	T	T	T
0.1635083439438296	0.1689845820387763	0.5874319456834267	T	T	T
0.5080021684120281	0.9944591912794485	0.6463906303989586	T	T	T
0.1660601106735996	0.6657387316928026	0.5866900132505887	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F

0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8134729654651759	0.8537579719759931	0.6610262507479385	T	T	T
0.8505813809345923	0.8069733513835811	0.5726636835900817	T	T	T
0.2727608033131950	0.7269934581680871	0.5984288354702386	T	T	T
0.3941500216016098	0.9336705284844670	0.6381462548831730	T	T	T
0.7488940824425364	0.5122022894723961	0.6078816576121185	T	T	T
0.9228981997432369	0.1531760912979318	0.6251575614490114	T	T	T
0.4930531233934141	0.2323887143301005	0.5982452093405676	T	T	T
0.1656942177015840	0.4382713583134958	0.6380274117374232	T	T	T
0.3945798112929046	0.7623571646558227	0.6806407320103166	T	T	T
0.3438996487540791	0.8501258450925336	0.5726406087469219	T	T	T
0.9990406689515001	0.2739320948583857	0.5999391978741485	T	T	T
0.6626653717837494	0.3950752222583541	0.6346292644190560	T	T	T
0.7385630606086711	0.7478746198724550	0.6082710546493071	T	T	T
0.9322678958771812	0.9194080321741550	0.6286735440842488	T	T	T
0.2714544541091215	0.4950039523826877	0.5986596966447904	T	T	T
0.3873492381022806	0.1717075727181296	0.6397014659857798	T	T	T
0.8515548271288953	0.3275974975159122	0.6610599760027186	T	T	T
0.8045921512882985	0.3437022984427570	0.5721996963471068	T	T	T
0.7297114596833847	0.9982487626595711	0.6012456940252449	T	T	T

0.9404808172647460	0.6605478937866487	0.6345772898932223	T	T	T
0.5120083333336233	0.7406887250564361	0.6093906638985496	T	T	T
0.1496745055927087	0.9258637211672545	0.6255558624922442	T	T	T
0.2322091002288967	0.2725845976842541	0.5978063251202984	T	T	T
0.4309661441237594	0.3957150575774501	0.6395995736124059	T	T	T
0.4814894993415534	0.5273123380711315	0.6039046774723069	T	T	T
0.1844369707701519	0.1413294917112239	0.6298114188919398	T	T	T
0.5954493611125681	0.0684220440536325	0.6581564216999765	T	T	T
0.0607099656476974	0.6045067274908057	0.5757040142322888	T	T	T
0.0781346648978013	0.8983549189796333	0.6852793581960192	T	T	T
0.5843698689144408	0.8234998029399412	0.5673114296306232	T	T	T
0.8297958353903923	0.5738714473310720	0.6594271603105385	T	T	T
0.8356183028283785	0.1003455722795281	0.5778744106609205	T	T	T
0.9902881526813571	0.4822781464681883	0.6024765820131723	T	T	T
0.6711389184521930	0.1869942563597461	0.6305737568166222	T	T	T
0.2499165445860637	0.5831514647404268	0.6798508156091020	T	T	T
0.3321367422556450	0.0610316096743818	0.5765350511895695	T	T	T
0.0741567958432376	0.0897744226124200	0.6672883069125319	T	T	T
0.5921678071441803	0.5861545422533155	0.5671494230624088	T	T	T
0.6021665242947305	0.8319765643257012	0.6597028290569537	T	T	T
0.0627992237811041	0.8362003392639613	0.5778035754007103	T	T	T
0.5240835748656777	0.9907181781838895	0.6039441233849905	T	T	T
0.1378161675186935	0.6766055632676397	0.6284676499837304	T	T	T
0.0637187522576818	0.3365356646341484	0.6577470781251953	T	T	T
0.6039492433565492	0.3328426229050304	0.5763828117270697	T	T	T
0.8331477284197252	0.0885898321633413	0.6675756907066960	T	T	T
0.8203805333162911	0.5935350872926678	0.5667973174915312	T	T	T
0.5898481023616957	0.5956338455281288	0.6582837255085348	T	T	T
0.1010229147333182	0.0637677614497040	0.5774788836945226	T	T	T
0.3494271612257294	0.6486053410819488	0.6756060718544477	T	T	T
0.1324182413646125	0.7415184672610452	0.6841305386638634	T	T	T
0.2347107644360686	0.8589907395338074	0.6850018597728657	T	T	T

Best + 2

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7539888005269807	0.0058191221243145	0.6450881072053918	T	T	T
0.9054233317060220	0.6553754950892929	0.5917696051770546	T	T	T
0.4257097207880631	0.6798638942330719	0.5834561620710302	T	T	T
0.2497694106344793	0.9762327437177512	0.6488709039653283	T	T	T
0.7304983427871311	0.5077391082402565	0.6493574944983366	T	T	T
0.9294677407077400	0.1777572623786022	0.5836532891330394	T	T	T
0.4024179146064190	0.1551478773868875	0.5918623343930324	T	T	T
0.2651880551949721	0.5134956101821562	0.6406483830905855	T	T	T
0.2266755599512595	0.7597843382824840	0.6445885165365199	T	T	T
0.4405455515869298	0.9043651673725747	0.5914872498960515	T	T	T
0.8940524816843923	0.4277591966538263	0.5830783708515720	T	T	T
0.7713071637968770	0.2463644190007160	0.6471989640548129	T	T	T

0.7686786430907762	0.7392621949645376	0.6497057482300540	T	T	T
0.8913343229226617	0.9311373786104589	0.5839395322981182	T	T	T
0.4424785309458938	0.4019223482471799	0.5918491478878645	T	T	T
0.2202530189685193	0.2646453590410979	0.6408511886997703	T	T	T
0.0118497644619419	0.2323996801140676	0.6429174525314905	T	T	T
0.6541308432302454	0.4411803049188596	0.5914779181199230	T	T	T
0.6790360487591265	0.8936447326128363	0.5832111469015973	T	T	T
0.9829443344214730	0.7808004219433330	0.6478316161036434	T	T	T
0.4931958387277731	0.7675204887989296	0.6495773104966366	T	T	T
0.1767559742414345	0.8935178890670877	0.5841085797126800	T	T	T
0.1557147621357035	0.4417046620121607	0.5917954645926814	T	T	T
0.5129750666708609	0.2202654149499843	0.6410490029446857	T	T	T
0.0021778699732549	0.9951932119507746	0.6489367219889189	T	T	T
0.6665749232653254	0.6672314329954858	0.5864483357789027	T	T	T
0.9928710865681671	0.4979245722921155	0.6450259437243628	T	T	T
0.6682108626971874	0.1632091611760363	0.5879123334497665	T	T	T
0.4928117283027250	0.5135600321783492	0.6454609392285843	T	T	T
0.1649233399886293	0.1660919349664410	0.5877417181034820	T	T	T
0.5113435935061669	0.9913017474564854	0.6451558952060387	T	T	T
0.1674156443146157	0.6682305611954401	0.5876666832504925	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F



0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8192149603301286	0.8464916989943725	0.6599926996493876	T	T	T
0.8508803512919032	0.8068647880885340	0.5725763216329072	T	T	T
0.2711013860077065	0.7295044611829615	0.6006939928289672	T	T	T
0.4016454577483338	0.9399135328515934	0.6344046423192039	T	T	T
0.7476091726786197	0.5139689568267602	0.6077666849083685	T	T	T
0.9233059524898973	0.1556086559857090	0.6269050784396875	T	T	T
0.4962622846831919	0.2312537726461598	0.5984570125672102	T	T	T
0.1721587606342536	0.4374655568284261	0.6392405054886738	T	T	T
0.3355418484531176	0.8090255756683241	0.6583183514307773	T	T	T
0.3422335467538192	0.8510956171665618	0.5725520962171973	T	T	T
0.9995358190366037	0.2733588971554820	0.6002689223520068	T	T	T
0.6603504954630834	0.4028663489321508	0.6351361004892471	T	T	T
0.7393308435457856	0.7474794415797014	0.6078034375132335	T	T	T
0.9159331795306846	0.9344529454080682	0.6267846149310348	T	T	T
0.2734898845134248	0.4943225336465284	0.5980729420844942	T	T	T
0.3887121795748105	0.1715324086042050	0.6389614794623560	T	T	T
0.8485711310540763	0.3484746141820417	0.6611905423095569	T	T	T
0.8063183019697512	0.3434286435839625	0.5726783787725530	T	T	T
0.7261015001296774	0.9993609301162838	0.6005251969009776	T	T	T
0.9432869576978077	0.6600802151168129	0.6346983318398143	T	T	T

0.5140382861272039	0.7380917059995745	0.6077374643277890	T	T	T
0.1501759651505634	0.9307900324595623	0.6269243763159487	T	T	T
0.2309940438971115	0.2715480937222934	0.5982499521931772	T	T	T
0.4398932241795521	0.3892477232944602	0.6394522110145672	T	T	T
0.4808489568642433	0.5267357063302893	0.6029344421400303	T	T	T
0.1812885722311288	0.1361770510593938	0.6314680559878468	T	T	T
0.5927971938452714	0.0672460781495259	0.6586446014985721	T	T	T
0.0626032974418186	0.6052839141557937	0.5762462622163087	T	T	T
0.0768300272263928	0.8382888333853121	0.6666300674326749	T	T	T
0.5849747868230455	0.8223553561598003	0.5667803570059261	T	T	T
0.8278488296484241	0.5748251357467459	0.6595138683033783	T	T	T
0.8356735454229121	0.1018243526801079	0.5779903862725589	T	T	T
0.9922176826235789	0.4813606720174626	0.6026594358419989	T	T	T
0.6807582256734733	0.1783351494101487	0.6317269931893991	T	T	T
0.3334784934998384	0.5975695085713442	0.6584743344596985	T	T	T
0.3317071443820094	0.0621203786206822	0.5764176517260333	T	T	T
0.2000062909725832	0.0249969942107987	0.6884261697902946	T	T	T
0.5920935141846745	0.5853251839451979	0.5668957428902232	T	T	T
0.6002357437266572	0.8263099604771358	0.6585010263003306	T	T	T
0.0617167853931946	0.8372859676023914	0.5782662446282179	T	T	T
0.5262853278867203	0.9921617800899614	0.6025846297698179	T	T	T
0.1386319591501928	0.6754910134624877	0.6302413701371162	T	T	T
0.0647735821895085	0.3375725485494234	0.6575766072004179	T	T	T
0.6062835232058037	0.3312194452578255	0.5767362110175851	T	T	T
0.8052940800333955	0.0353324970768419	0.6832221831446953	T	T	T
0.8224296707284741	0.5927915459103369	0.5668454412366463	T	T	T
0.5686333495416416	0.6014447391690152	0.6598889948349024	T	T	T
0.1001690641382782	0.0632741416420937	0.5779044448328953	T	T	T
0.0511686493120747	0.1026936045114676	0.6869325128456415	T	T	T
0.8597307487449984	0.1265050435708127	0.6877908783080526	T	T	T
0.8911769825056832	0.2798218803425151	0.6965211669453600	T	T	T

Best + 3

In O Pt

1.0000000000000000

14.6383517878741038 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3191758939370519 12.6771845178323304 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 51.0694492725965290

In O Pt

64 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320 0.0111480013333320 0.4668317439885570 F F F

0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7525142026330635	0.0073442518469231	0.6423628241708013	T	T	T
0.9047766789432636	0.6563279067478451	0.5930638057118716	T	T	T
0.4296504962972890	0.6776755335905633	0.5834349069712406	T	T	T
0.2403642948677306	0.9816294683169621	0.6494818944024781	T	T	T
0.7433401890567224	0.4898357335607195	0.6519733360941750	T	T	T
0.9284455373003411	0.1821278925539142	0.5826637987134494	T	T	T
0.4016533544692755	0.1557126305907624	0.5919493416713985	T	T	T
0.2669715725122275	0.5137390889745062	0.6413907416698150	T	T	T
0.2342877212043681	0.7586754745367335	0.6446447900208592	T	T	T
0.4407568117971307	0.9044135602403260	0.5923021802986961	T	T	T
0.8951478006006590	0.4280011181474140	0.5838529190799849	T	T	T
0.7702650266374664	0.2434509568119696	0.6474880437373614	T	T	T
0.7698912217634031	0.7397481223878323	0.6523538273385338	T	T	T

0.8899222448898425	0.9282878410777180	0.5824336615557606	T	T	T
0.4425424320889251	0.4031731440880449	0.5919897161288314	T	T	T
0.2186310783716112	0.2668162048391501	0.6411615958653684	T	T	T
0.0118032851784260	0.2264186677343452	0.6460119383919762	T	T	T
0.6559746973277867	0.4414703462244411	0.5920782292030684	T	T	T
0.6774739748874502	0.8921620608998090	0.5832752727991409	T	T	T
0.9874938390526791	0.7823353359062377	0.6504350077332725	T	T	T
0.4938889160693500	0.7666004119319676	0.6510278836806270	T	T	T
0.1839660813740460	0.8881058079040310	0.5821350961132877	T	T	T
0.1550631767613386	0.4427600888198621	0.5920350981697405	T	T	T
0.5113024667453250	0.2206853639934968	0.6411677074517724	T	T	T
0.0071065424719260	0.9965695309074447	0.6348778662903486	T	T	T
0.6686936579929287	0.6658162389823266	0.5883909670476399	T	T	T
0.9931237041856089	0.4984169067730655	0.6466084603721907	T	T	T
0.6676720338876143	0.1648365866546674	0.5874646683051640	T	T	T
0.4976457676342274	0.5124074953234378	0.6459580092583873	T	T	T
0.1636686589659600	0.1669568590023550	0.5881355343599044	T	T	T
0.5085244388754149	0.9920130113037255	0.6457342244408985	T	T	T
0.1675848802675118	0.6685896763539761	0.5880648291238699	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F

0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F
0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8267336271118324	0.8540011289443421	0.6668509836069063	T	T	T
0.8492454749432439	0.8050468435037038	0.5724012476397439	T	T	T
0.2754292588814801	0.7245230648112431	0.6002155568220547	T	T	T
0.3985216007184932	0.9395427037528876	0.6358589679656923	T	T	T
0.7508351361717234	0.5110876518938224	0.6096790869239656	T	T	T
0.9158977160282786	0.1607274891233958	0.6247730656459924	T	T	T
0.4962931822475384	0.2315066058439063	0.5985235608478140	T	T	T
0.1707131263278467	0.4403167755766597	0.6402391168156868	T	T	T
0.3318298355118935	0.8173139541530305	0.6618369547923411	T	T	T
0.3471244009591001	0.8490494731316731	0.5720985438962407	T	T	T
0.9995593002656797	0.2733010237738861	0.6011310821004368	T	T	T
0.6633510641357243	0.4006534729553132	0.6353267559895579	T	T	T
0.7401432735627755	0.7494093327312311	0.6099326123646006	T	T	T
0.9165050345658610	0.9226888592178542	0.6246299834400383	T	T	T
0.2727584565388587	0.4961502845220442	0.5987736223113043	T	T	T
0.3882639679016479	0.1719718853681135	0.6393882434095940	T	T	T
0.8565438381749751	0.3223821561762804	0.6661318826269250	T	T	T
0.8055476356328247	0.3456492433557635	0.5723702562737164	T	T	T
0.7242992516406920	0.9997651589927065	0.5998382092744483	T	T	T
0.9385557027939465	0.6680855047554198	0.6374297172690998	T	T	T
0.5137248200044029	0.7390714404064445	0.6089484302282266	T	T	T

0.1661615449219558	0.9183820732509157	0.6235145559833264	T	T	T
0.2303714221332776	0.2731910447169932	0.5985665945622931	T	T	T
0.4414962831870075	0.3895031597151806	0.6396608170982454	T	T	T
0.4839968006185135	0.5257809289117652	0.6033877109310126	T	T	T
0.1829505256938358	0.1379972496010281	0.6319370486594728	T	T	T
0.5949371873840157	0.0651547856075729	0.6581643783673357	T	T	T
0.0622571022298383	0.6067162513638459	0.5769576974396010	T	T	T
0.0779809966134287	0.8522161610770077	0.6668464403837865	T	T	T
0.5863591784717155	0.8201650716758901	0.5673162507685598	T	T	T
0.8290133787363640	0.5724281582674005	0.6605472481361425	T	T	T
0.8365432335546714	0.1004949916870179	0.5780641080630735	T	T	T
0.9913396612867262	0.4846160760653698	0.6040533144565362	T	T	T
0.6811054393561872	0.1771401924276954	0.6313805006211519	T	T	T
0.3373102035887215	0.5979046516323736	0.6585004294334429	T	T	T
0.3311716593700582	0.0624387289089961	0.5767544779909011	T	T	T
0.0831657267423113	0.0677527915325622	0.6671334172686965	T	T	T
0.5943410305582091	0.5859262880231026	0.5673002320246742	T	T	T
0.6009947488156188	0.8275460204226626	0.6602408879373264	T	T	T
0.0625105119534301	0.8374878348874059	0.5783017711598647	T	T	T
0.5255737917276707	0.9917103780622016	0.6031631690296048	T	T	T
0.1402361249421316	0.6801591572881209	0.6320960241536608	T	T	T
0.0643686805737329	0.3358137110985921	0.6582518588450248	T	T	T
0.6065007750710704	0.3320292910637588	0.5767803750514482	T	T	T
0.7999528428503543	0.1069925632288031	0.7115033025102357	T	T	T
0.8228118510137596	0.5927055682611421	0.5676650400581974	T	T	T
0.5756356746578963	0.5980358347892676	0.6602206462266016	T	T	T
0.0998128251872949	0.0623030647776295	0.5781613396422437	T	T	T
0.9821230678228728	0.0107571312239390	0.6832731324466348	T	T	T
0.8248910674777632	0.9827313515179832	0.6912405185499201	T	T	T
0.8394405347407128	0.2006835427820725	0.6941606696458917	T	T	T

Best+ 5

In O Pt

1.0000000000000000			
14.6383517878741038	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
7.3191758939370519	12.6771845178323304	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	51.0694492725965290	

In O Pt

64 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7611480013333320	0.0111480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.2388520043333315	0.9888520043333315	0.4746588917436156	F	F	F

0.7388519966666678	0.4888520196666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.2611479936666683	0.5111480166666666	0.4668317466799934	F	F	F
0.2277039973333359	0.7611480013333320	0.4668317439885570	F	F	F
0.7722959913333298	0.2388520043333315	0.4746588917436156	F	F	F
0.7722959836666661	0.7388519966666678	0.4746588944350378	F	F	F
0.2277039896666651	0.2611479936666683	0.4668317466799934	F	F	F
0.0111480013333320	0.2277039973333359	0.4668317439885570	F	F	F
0.9888520043333315	0.7722959913333369	0.4746588917436156	F	F	F
0.4888520196666661	0.7722959836666661	0.4746588944350378	F	F	F
0.5111480166666666	0.2277039896666651	0.4668317466799934	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4707453188607431	F	F	F
0.9999999846666654	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.5000000076666637	0.4707453242436088	F	F	F
0.5000000076666637	0.9999999846666654	0.4707453242436088	F	F	F
0.5714614760499686	0.3220635869978707	0.5335266216303154	F	F	F
0.0954565668243177	0.3446929456050469	0.5253897752549719	F	F	F
0.5951195294231795	0.8450268277640021	0.5249275287208306	F	F	F
0.0713873525637467	0.8214752461005688	0.5333848297685080	F	F	F
0.1064749369521607	0.5714614760499686	0.5335266216303154	F	F	F
0.5598504875706354	0.0954565668243177	0.5253897752549719	F	F	F
0.5598536428128256	0.5951195294231795	0.5249275287208306	F	F	F
0.1071374013356774	0.0713873525637467	0.5333848297685080	F	F	F
0.3220635869978707	0.1064749369521607	0.5335266216303154	F	F	F
0.3446929456050469	0.5598504875706354	0.5253897752549719	F	F	F
0.8450268277640021	0.5598536428128256	0.5249275287208306	F	F	F
0.8214752461005688	0.1071374013356774	0.5333848297685080	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.5295973615149521	F	F	F
0.3334481086611234	0.8333859062698394	0.5291799365853791	F	F	F
0.8333859062698394	0.8331659850690301	0.5291799365853791	F	F	F
0.8331659850690301	0.3334481086611234	0.5291799365853791	F	F	F
0.7616426346313175	0.0088487540385633	0.6456476663337238	T	T	T
0.9035938617354827	0.6556496990750766	0.5925492225653921	T	T	T
0.4327435412973946	0.6773301151987259	0.5828200715911106	T	T	T
0.2324612393127325	0.9828639566410265	0.6527676285602149	T	T	T
0.7412860448445361	0.4901069106038458	0.6512073554532206	T	T	T
0.9274046983372523	0.1837528035857477	0.5822661715430982	T	T	T
0.4029331977307605	0.1557501350129646	0.5922146414858702	T	T	T
0.2639960451599202	0.5147974481809292	0.6420900114476019	T	T	T
0.2397832028216767	0.7512550273071820	0.6366191013688071	T	T	T
0.4386239640723481	0.9059849636608969	0.5931626590258077	T	T	T
0.8928867415835510	0.4292517190569732	0.5834548873641797	T	T	T
0.7812054236840849	0.2360362173121764	0.6504025920652615	T	T	T
0.7678207834669446	0.7402327800754983	0.6508723663876429	T	T	T
0.8903143716452474	0.9278306643649260	0.5832148533829261	T	T	T

0.4413230459349063	0.4043651825345168	0.5921958395001732	T	T	T
0.2197854472345240	0.2645764193536129	0.6413740096056310	T	T	T
0.0075712582815911	0.2351586401114271	0.6440390303597785	T	T	T
0.6551790532734427	0.4396878177063456	0.5932301022282956	T	T	T
0.6774502110205503	0.8946630818779184	0.5837720672413584	T	T	T
0.9829642677849110	0.7734749698532355	0.6519867485568190	T	T	T
0.4978121662064969	0.7658865101957636	0.6512799680514725	T	T	T
0.1800394362551487	0.8927797518755242	0.5820987854509251	T	T	T
0.1547688755059268	0.4413612840626661	0.5921823518300868	T	T	T
0.5142524087918040	0.2211898958909078	0.6418037773793397	T	T	T
0.9945497110762327	0.0073826666483948	0.6365316437813975	T	T	T
0.6668423770209887	0.6673479846010567	0.5877212811801407	T	T	T
0.9913660487038736	0.4973693238617470	0.6460775748332649	T	T	T
0.6694667912440156	0.1642321896105367	0.5883438656887744	T	T	T
0.4978803415178680	0.5100256846897221	0.6472416184186486	T	T	T
0.1649350459954121	0.1662966087158587	0.5882878371968919	T	T	T
0.5087919692330825	0.9936155311240439	0.6466597053065299	T	T	T
0.1626188926902655	0.6674099711739722	0.5870471398653814	T	T	T
0.8159583373333348	0.8601013333333327	0.4862116819395084	F	F	F
0.3946230123333336	0.9387660083333316	0.4585959608606061	F	F	F
0.9187303516666674	0.1545573616666687	0.4501329301675625	F	F	F
0.1692716669999967	0.4334446800000009	0.4604640541843779	F	F	F
0.3239403293333325	0.8159583373333348	0.4862116819395084	F	F	F
0.6666109793333348	0.3946230123333336	0.4585959608606061	F	F	F
0.9267122866666639	0.9187303516666674	0.4501329301675625	F	F	F
0.3972836530000023	0.1692716669999967	0.4604640541843779	F	F	F
0.8601013333333327	0.3239403293333325	0.4862116819395084	F	F	F
0.9387660083333316	0.6666109793333348	0.4585959608606061	F	F	F
0.1545573616666687	0.9267122866666639	0.4501329301675625	F	F	F
0.4334446800000009	0.3972836530000023	0.4604640541843779	F	F	F
0.1840416783333296	0.1398986823333317	0.4552789502821071	F	F	F
0.6053770033333308	0.0612340073333328	0.4828946713610023	F	F	F
0.0812696673333306	0.8454426573333365	0.4913577008838672	F	F	F
0.8307283486666677	0.5665553356666635	0.4810265780372305	F	F	F
0.6760596393333316	0.1840416783333367	0.4552789502821071	F	F	F
0.3333889893333364	0.6053770033333308	0.4828946713610023	F	F	F
0.0732876753333329	0.0812696673333306	0.4913577008838672	F	F	F
0.6027163156666688	0.8307283486666677	0.4810265780372305	F	F	F
0.1398986823333317	0.6760596393333316	0.4552789502821071	F	F	F
0.0612340073333328	0.3333889893333364	0.4828946713610023	F	F	F
0.8454426573333365	0.0732876753333329	0.4913577008838672	F	F	F
0.5665553356666635	0.6027163156666688	0.4810265780372305	F	F	F
0.5157927795144346	0.4732687373369373	0.5137680585633078	F	F	F
0.9389780411721915	0.3945739458359014	0.5412288865474011	F	F	F



0.4138055884135099	0.1792879430058036	0.5501013560831254	F	F	F
0.1643402231079705	0.8991522013241848	0.5396430093322451	F	F	F
0.0109384831486281	0.5157927795144346	0.5137680585633078	F	F	F
0.6664480129919070	0.9389780411721915	0.5412288865474011	F	F	F
0.4069064685806794	0.4138055884135099	0.5501013560831254	F	F	F
0.9365075755678447	0.1643402231079705	0.5396430093322451	F	F	F
0.4732687373369373	0.0109384831486281	0.5137680585633078	F	F	F
0.3945739458359014	0.6664480129919070	0.5412288865474011	F	F	F
0.1792879430058036	0.4069064685806794	0.5501013560831254	F	F	F
0.8991522013241848	0.9365075755678447	0.5396430093322451	F	F	F
0.1502078384511734	0.1932397001298156	0.5448734685138632	F	F	F
0.7272745789267816	0.2725057257219632	0.5171331615441943	F	F	F
0.2523256400471894	0.4873897408432910	0.5086482917388153	F	F	F
0.5022127006463535	0.7673910184547594	0.5188430143373637	F	F	F
0.6565524614190181	0.1502078384511734	0.5448734685138632	F	F	F
0.0002196953512481	0.7272745789267816	0.5171331615441943	F	F	F
0.2602846191095196	0.2523256400471894	0.5086482917388153	F	F	F
0.7303962808988871	0.5022127006463535	0.5188430143373637	F	F	F
0.1932397001298156	0.6565524614190181	0.5448734685138632	F	F	F
0.2725057257219632	0.0002196953512481	0.5171331615441943	F	F	F
0.4873897408432910	0.2602846191095196	0.5086482917388153	F	F	F
0.7673910184547594	0.7303962808988871	0.5188430143373637	F	F	F
0.8140060295406928	0.8537305896534010	0.6618332504076568	T	T	T
0.8493774480513449	0.8053452302583942	0.5724884826816328	T	T	T
0.2750316443493737	0.7230256995784562	0.5963371817242598	T	T	T
0.3937139512654919	0.9397851870021470	0.6378737152267852	T	T	T
0.7472299282693544	0.5128411051698147	0.6091224154562511	T	T	T
0.9155973254118159	0.1651936972855889	0.6236107093408886	T	T	T
0.4966334452284048	0.2327016420253561	0.5991895261400223	T	T	T
0.1704142948916040	0.4393605926059838	0.6398585671052038	T	T	T
0.3374966115257607	0.8061072670369113	0.6620527879584065	T	T	T
0.3454115922219163	0.8501056768818882	0.5725128891681274	T	T	T
0.0005182299770606	0.2749914168936226	0.6001793404281369	T	T	T
0.6615863190408282	0.3956797930085880	0.6366559214591639	T	T	T
0.7394206167473426	0.7479777859974575	0.6088670003164036	T	T	T
0.9265592984109301	0.9132718100919257	0.6257059149123739	T	T	T
0.2714202821022684	0.4971738504815425	0.5991797625157244	T	T	T
0.3893965671509191	0.1720218344357204	0.6397843813601349	T	T	T
0.8524680439682462	0.3290940069699163	0.6623675745885130	T	T	T
0.8036976204750428	0.3469192545436799	0.5722449388901045	T	T	T
0.7273354828653680	-0.0001131855678878	0.6009466891916077	T	T	T
0.9409132300035967	0.6611917530236057	0.6360049914046172	T	T	T
0.5124731581222121	0.7404522728002206	0.6090949211672109	T	T	T
0.1595608956740936	0.9186699878788009	0.6248220836416635	T	T	T

0.2311535601538071	0.2720147498738407	0.5987729858086049	T	T	T
0.4375082048606962	0.3936305649881819	0.6407115366636936	T	T	T
0.4808760435859727	0.5285211904607339	0.6045074554243715	T	T	T
0.1817365958056271	0.1364579992852415	0.6322082924417961	T	T	T
0.5982441742546633	0.0662379879270219	0.6586256747905656	T	T	T
0.0603385060777629	0.6046919110433606	0.5762477679247235	T	T	T
0.1726290760185720	0.9144380231880851	0.6959849870638328	T	T	T
0.5843728157391294	0.8231917794080398	0.5675410160131733	T	T	T
0.8268741911521040	0.5734277158456826	0.6600079318512074	T	T	T
0.8375095253676657	0.0997493801949323	0.5781990494955512	T	T	T
0.9905069066619565	0.4834234156912909	0.6034770693005230	T	T	T
0.6822289818846172	0.1796376541040331	0.6328603424491350	T	T	T
0.3323056447746857	0.6035889713134484	0.6615519326823837	T	T	T
0.3319073618917232	0.0623894558429776	0.5768708780952715	T	T	T
0.0666529164309863	0.0854700319504761	0.6664457045959558	T	T	T
0.5946316079762570	0.5839331750702770	0.5673176376333797	T	T	T
0.6003482427025512	0.8281872740169522	0.6601234691149643	T	T	T
0.0624273212277645	0.8373467743574153	0.5780002811634776	T	T	T
0.5247751899593361	0.9914972765533228	0.6040912398572201	T	T	T
0.1378566242062659	0.6819090687295424	0.6307498965543367	T	T	T
0.0651775763018118	0.3368390475019107	0.6584758827703969	T	T	T
0.6054263284104938	0.3325426477886215	0.5771157805026448	T	T	T
0.8603553378754143	0.0728541869446723	0.6678563805610188	T	T	T
0.8212144776214262	0.5932236956849752	0.5672445968256549	T	T	T
0.5746615584436945	0.5982024585600331	0.6604991040315447	T	T	T
0.0995345481649984	0.0635938648367021	0.5780477084749558	T	T	T
0.2386577097151230	0.7671606006733807	0.6857669787126950	T	T	T
0.0537827437287081	0.7994640483558629	0.6975535340088566	T	T	T
0.0232632737259747	0.9844421717001323	0.6858329428172781	T	T	T

---

**Pt- dimer on Indium Tin Oxide ( In order of increasing energy as shown in the SI)**

Best:

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O Pt

56 8 96 2

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7610635534627560	0.0161751843220338	0.6421696544817993	T	T	T
0.9066400033912941	0.6529923165289062	0.5897556967586276	T	T	T
0.4257614305240763	0.6779162071249438	0.5819082254261109	T	T	T
0.2341720271269008	0.9828142152582350	0.6450335298032288	T	T	T
0.9302251264786890	0.1773862862775558	0.5819543890614280	T	T	T
0.4029806864089267	0.1539033787113716	0.5903965405345488	T	T	T
0.2606619494802385	0.5135418715700503	0.6385060131933085	T	T	T
0.2233833650324795	0.7587723828264984	0.6411347414491654	T	T	T
0.4400792670819247	0.9053587903298562	0.5904242342243384	T	T	T
0.8944963951953305	0.4264478053375330	0.5829293362835017	T	T	T
0.7831106827579138	0.2330823642128305	0.6455036655921542	T	T	T
0.8917172345456030	0.9300186240271597	0.5816689207957861	T	T	T
0.4403921261929503	0.3991257274781105	0.5899429608642609	T	T	T
0.2247191403802473	0.2579145884245549	0.6385955119400537	T	T	T
0.0133352241073506	0.2268984456479540	0.6419054281391705	T	T	T
0.6519810345196599	0.4397352338575527	0.5903632567371560	T	T	T

0.6789657396288554	0.8936569267525079	0.5821564321590954	T	T	T
0.9857422939678058	0.7870810479494041	0.6437914512335247	T	T	T
0.1768819199911873	0.8912322257965457	0.5817773129853615	T	T	T
0.1542350166548765	0.4398909907642622	0.5903565963737986	T	T	T
0.5154674423994263	0.2207120467364621	0.6386392236949330	T	T	T
0.6657296099116088	0.6661499654278031	0.5874159864534642	T	T	T
0.0072199197155984	0.4923387597605124	0.6456598732821442	T	T	T
0.6690607052457269	0.1635105472952885	0.5861663712966931	T	T	T
0.4844175467804911	0.5046706352792113	0.6420073668084265	T	T	T
0.1648250910442064	0.1656972858631237	0.5859721190309528	T	T	T
0.5121668922969258	0.9979995560692568	0.6438558248373506	T	T	T
0.1673738964691019	0.6658873791392198	0.5858043685015877	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7217100187515783	0.4893396660704079	0.6492582431016832	T	T	T
0.7852620011801814	0.7450892894394623	0.6475928446780959	T	T	T
0.4785142101633279	0.7660292532759129	0.6477445363072283	T	T	T
0.0007440830421332	0.0015358978175288	0.6459733947526254	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F

0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8253463855446127	0.8560984897733800	0.6576548034834564	T	T	T
0.8493474581958301	0.8048742388786885	0.5709890073981545	T	T	T
0.2713893151196595	0.7274399284651606	0.5983567657972620	T	T	T
0.4039686277607858	0.9344244409608548	0.6354747032215867	T	T	T
0.7427911667356160	0.5125870279190825	0.6095072782390276	T	T	T
0.9302698844140619	0.1453692835624812	0.6232923274349356	T	T	T
0.4971403510697223	0.2290217430887787	0.5963446267139035	T	T	T
0.1748010431819709	0.4324694416822128	0.6370266109931225	T	T	T
0.3249525928848300	0.8154982106102587	0.6559954877573443	T	T	T
0.3437744406753498	0.8497991682759879	0.5710925923506696	T	T	T
0.0004185463485804	0.2709878921435104	0.5985666178664688	T	T	T
0.6570025441831990	0.3957617252694286	0.6343261357239820	T	T	T
0.7389681777950622	0.7490358329407469	0.6088715253962322	T	T	T
0.9253217557976364	0.9351033689662441	0.6225356680363098	T	T	T
0.2706415544962426	0.4935368916480499	0.5962039517820152	T	T	T
0.3930704363199573	0.1688398271780510	0.6369755383336920	T	T	T
0.8478833103414747	0.3332467877432555	0.6558237370665780	T	T	T
0.8050773769518947	0.3452383838417331	0.5715678114348043	T	T	T
0.7286191698772276	0.9985408592740381	0.5988556984638533	T	T	T
0.9401794154810617	0.6749246422497266	0.6299578862941723	T	T	T

0.5070866750146896	0.7441397210134023	0.6078343559214751	T	T	T
0.1449547428805071	0.9252557664361543	0.6229343711434812	T	T	T
0.2328828467657139	0.2699860654919388	0.5963298103479143	T	T	T
0.4327931896254196	0.3883394187689717	0.6366571602293536	T	T	T
0.4774653609246019	0.5233942787963444	0.5999857630501462	T	T	T
0.1884643337829743	0.1322316389743750	0.6275792042719094	T	T	T
0.6013206333825419	0.0714378105357030	0.6561023007044305	T	T	T
0.0627780738517083	0.6031940173302920	0.5741275796083147	T	T	T
0.0731618366214599	0.8510832705645721	0.6628397005914689	T	T	T
0.5877705528157361	0.8189573699862135	0.5666254602249509	T	T	T
0.6987873447668375	0.5679074330597657	0.6868098544048128	T	T	T
0.8358216874410639	0.1013066439175370	0.5756831652098111	T	T	T
0.9928002921918881	0.4818163919048871	0.6023989848918775	T	T	T
0.6778985601925440	0.1862938809223800	0.6281997416382361	T	T	T
0.3266156088639663	0.5989825368487114	0.6558729412501547	T	T	T
0.3328633840588403	0.0608858461991927	0.5746604559849038	T	T	T
0.0788676535850592	0.0724631835650444	0.6631958214143344	T	T	T
0.5916190341215308	0.5867601783930845	0.5666010789953210	T	T	T
0.6297472329718272	0.8559228593762660	0.6615765703699656	T	T	T
0.0623610101595252	0.8338716082367250	0.5757362951384710	T	T	T
0.5259350173280246	0.9908786374895914	0.6015914308730200	T	T	T
0.1375746869589941	0.6758981977020871	0.6278505809700224	T	T	T
0.0751091413134334	0.3232920766796359	0.6558319672914524	T	T	T
0.6056134985886028	0.3306496734820759	0.5746560370373112	T	T	T
0.8514709069217166	0.0776985107702415	0.6635384859880802	T	T	T
0.8198604830617120	0.5906436703848900	0.5668859045436135	T	T	T
0.5527213953932463	0.5986131162162199	0.6488167874663244	T	T	T
0.1013303052335092	0.0616370106501533	0.5756313978508593	T	T	T
0.8362898380691420	0.5671570889985869	0.6711893548700520	T	T	T
0.6349179251925904	0.7216803619570297	0.6757158729997609	T	T	T

Best + 1

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.1539898045825509 0.0117348602194267 44.4205337057521348

In Sn O Pt

56 8 96 2

Selective dynamics

Direct

0.7601299999999966 0.0111199999999982 0.3212997282865118 F F F

0.2434165335433676 0.9854015590178022 0.3303952552037757 F F F

0.7751763166389409	0.2373103908289238	0.3303952552037757	F	F	F
0.7758184051208019	0.7360378284433793	0.3303952583554732	F	F	F
0.0149432086993002	0.2262095211845576	0.3212997282865118	F	F	F
0.9921246538137325	0.7693967045361916	0.3303952552037757	F	F	F
0.4928005224042380	0.7693966968225325	0.3303952583554732	F	F	F
0.0028580599244989	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.5041760321789965	0.9965305487398979	0.3258474991741451	F	F	F
0.5754695993874179	0.3201690636836290	0.3988024242875312	F	F	F
0.1000335765341589	0.3427603350605963	0.3893470124551968	F	F	F
0.5996577811357540	0.8418219209004363	0.3888098595214231	F	F	F
0.0767109653050468	0.8183100051456691	0.3986376552181525	F	F	F
0.1114318610020959	0.5689322078448171	0.3988024242875312	F	F	F
0.5634797054024645	0.0941582901478952	0.3893470124551968	F	F	F
0.5641186345741858	0.5925506639960076	0.3888098595214231	F	F	F
0.1114494334935046	0.0701311676366885	0.3986376552181525	F	F	F
0.3261319662881945	0.1051291103740297	0.3988024242875312	F	F	F
0.3492093643680292	0.5573702775606932	0.3893470124551968	F	F	F
0.8488610604088223	0.5573745329822160	0.3888098595214231	F	F	F
0.8248676130051109	0.1057902286404513	0.3986376552181525	F	F	F
0.3383792532104977	0.8302004322606820	0.3937513645347082	F	F	F
0.8367796411124147	0.3315350310755605	0.3937513645347082	F	F	F
0.7420985760889067	0.4866741287148670	0.3303952583554732	F	F	F
0.3376277839809418	0.3314195471817456	0.3942364325472383	F	F	F
0.8376409987888778	0.8299810709125808	0.3937513645347082	F	F	F
0.7669331724767622	0.0136128670406646	0.5254465388450053	T	T	T
0.9106979334407724	0.6512029661990544	0.4649539381622292	T	T	T
0.4302774006285772	0.6772062453514580	0.4562871446508456	T	T	T
0.2407015489036483	0.9793501066049547	0.5298189675897481	T	T	T
0.9358533207791387	0.1744395981523233	0.4561952677674652	T	T	T
0.4076939972090194	0.1533052457880531	0.4661805890838339	T	T	T
0.2673918374511139	0.5150546191144514	0.5224768678758777	T	T	T
0.2290966091351326	0.7584463227070515	0.5259412757481969	T	T	T
0.4454700334486862	0.9044936221837675	0.4653763120722116	T	T	T
0.9027605273417189	0.4235458351832079	0.4578166082521297	T	T	T
0.7911124380274690	0.2281840883010079	0.5291907096856181	T	T	T
0.8984021731082728	0.9264458639509043	0.4571628446646063	T	T	T
0.4457040584851170	0.4001646753336314	0.4661866503787621	T	T	T
0.2287130052216207	0.2584092775402224	0.5218362227627330	T	T	T
0.0222684053809893	0.2226629334659839	0.5255374737246147	T	T	T
0.6585266696178567	0.4381967208585850	0.4659739315632097	T	T	T
0.6841373489585338	0.8922819263271387	0.4562715390861762	T	T	T
0.9918590128795836	0.7702146789379474	0.5361909963374473	T	T	T
0.1827186530579956	0.8889479432338262	0.4561746523467527	T	T	T
0.1607627268446341	0.4386048580149757	0.4662579902539410	T	T	T

0.5183077284399227	0.2207497675871009	0.5224208447784048	T	T	T
0.6708064678065041	0.6648386927326106	0.4618243509111988	T	T	T
0.0208950602097915	0.4993040550637890	0.5316142861521725	T	T	T
0.6729976462338819	0.1624510192588212	0.4611145827670182	T	T	T
0.4921793656342014	0.5121124682958810	0.5271551848702505	T	T	T
0.1709460594267046	0.1631673046258470	0.4609557155349443	T	T	T
0.5186031879855484	0.9928684095540479	0.5274719954867708	T	T	T
0.1699694936265650	0.6661248894698271	0.4614417637645392	T	T	T
0.2318915289287986	0.7582958518869418	0.3212997282865118	F	F	F
0.5035339362280098	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.2649692708826521	0.5089321445234489	0.3212997314382093	F	F	F
0.0035676858993980	0.9990756731962591	0.3258474928707500	F	F	F
0.7341495537447870	0.4806285960954373	0.5340875602868720	T	T	T
0.7788048861621618	0.7475075890367062	0.5322183382890423	T	T	T
0.4954583445476800	0.7700190482281825	0.5315573880784401	T	T	T
0.0067424784215014	0.9947418413469139	0.5307881051236085	T	T	T
0.2312494253227371	0.2595683989238466	0.3212997314382093	F	F	F
0.5142673705564675	0.2262095135495770	0.3212997314382093	F	F	F
0.8197245306682390	0.8569508763088862	0.3438201600901110	F	F	F
0.3987081608861587	0.9354815458449366	0.3117293471016254	F	F	F
0.9209922397635992	0.1532890848265680	0.3018948934479724	F	F	F
0.1730362783713417	0.4314418369345745	0.3139001625321427	F	F	F
0.3283148989230753	0.8129202287039874	0.3438201600901110	F	F	F
0.6696296955644030	0.3927234531479655	0.3117293471016254	F	F	F
0.9299447303656834	0.9155171710171928	0.3018948934479724	F	F	F
0.4004008100581657	0.1679411731758620	0.3139001625321427	F	F	F
0.8631193247769602	0.3221544605376110	0.3438201600901110	F	F	F
0.9417661356484075	0.6640191810841145	0.3117293471016254	F	F	F
0.1588437830399343	0.9234787908990896	0.3018948934479724	F	F	F
0.4368057691204541	0.3953728437525825	0.3139001625321427	F	F	F
0.1873433418511681	0.1386553765605854	0.3078748193479939	F	F	F
0.6083597115729162	0.0601247068673771	0.3399656321113582	F	F	F
0.0860756361414658	0.8423171707979833	0.3498000846394120	F	F	F
0.8340315940587928	0.5641644156990608	0.3377948166808480	F	F	F
0.6787529268564683	0.1826860237720780	0.3078748193479939	F	F	F
0.3374381297247666	0.6028827994856698	0.3399656321113582	F	F	F
0.0771230884463421	0.0800890850007647	0.3498000846394120	F	F	F
0.6066670156113929	0.8276650793790878	0.3377948166808480	F	F	F
0.1439485478357412	0.6734517452805591	0.3078748193479939	F	F	F
0.0653017366889372	0.3315870247342687	0.3399656321113582	F	F	F
0.8482240925665394	0.0721274080750689	0.3498000846394120	F	F	F
0.5702621035290605	0.6002333619871152	0.3377948166808480	F	F	F
0.5198187726736379	0.4710367487921232	0.3758420117279684	F	F	F
0.9426805682623609	0.3924764106726286	0.4077528311564294	F	F	F



0.4180544851025232	0.1777170637495047	0.4180630728800807	F	F	F
0.1697176184977991	0.8957742608203105	0.4059099647347324	F	F	F
0.0157015007558172	0.5134525626218860	0.3758420117279684	F	F	F
0.6712180398470551	0.9354949379856805	0.4077528311564294	F	F	F
0.4114658565705795	0.4116378360625106	0.4180630728800807	F	F	F
0.9398975868734993	0.1628324598200166	0.4059099647347324	F	F	F
0.4767584900125641	0.0098831757007858	0.3758420117279684	F	F	F
0.3993614858472370	0.6636585286003154	0.4077528311564294	F	F	F
0.1841461447858563	0.4047562752544636	0.4180630728800807	F	F	F
0.9035843176360459	0.9330345621793654	0.4059099647347324	F	F	F
0.1547644004390776	0.1916458452052581	0.4119880130487985	F	F	F
0.7307997352263129	0.2707766336215016	0.3797524253477320	F	F	F
0.2566607160774623	0.4851340867038942	0.3698925933407295	F	F	F
0.5066993712809946	0.7643982900759099	0.3817393573504972	F	F	F
0.6603693326687292	0.1487235043712474	0.4119880130487985	F	F	F
0.0053116273190454	0.7243880503595861	0.3797524253477320	F	F	F
0.2643070694647278	0.2506682497746482	0.3698925933407295	F	F	F
0.7342339744034376	0.4998948800842840	0.3817393573504972	F	F	F
0.1983330781461632	0.6537794249032487	0.4119880130487985	F	F	F
0.2762959286617175	0.9991836010246260	0.3797524253477320	F	F	F
0.4911154325054667	0.2586069723533484	0.3698925933407295	F	F	F
0.7714717372890760	0.7274977081085865	0.3817393573504972	F	F	F
0.8134417854784888	0.8600545095589420	0.5431440772104770	T	T	T
0.8535766673822666	0.8033358551562014	0.4433042731509805	T	T	T
0.2767077442613046	0.7253923329789767	0.4755137617730389	T	T	T
0.4063216233047163	0.9359773311380615	0.5165976076785570	T	T	T
0.7519470981499931	0.5108329777685446	0.4891852760325556	T	T	T
0.9381398873749189	0.1390404045848082	0.5038324718376078	T	T	T
0.5008104555412547	0.2298101182605239	0.4732018733101516	T	T	T
0.1880955347930548	0.4275731709637406	0.5183575469672789	T	T	T
0.3403029014902331	0.8119449868535200	0.5419114648115579	T	T	T
0.3490773557560484	0.8482695032422746	0.4434907491076971	T	T	T
0.0068496956926073	0.2672186886524825	0.4752396832251007	T	T	T
0.6616808205990662	0.3963931621622400	0.5182898405110551	T	T	T
0.7390333167078582	0.7483862713843692	0.4867563894417410	T	T	T
0.9325058568664859	0.9223631070468227	0.5057599937345958	T	T	T
0.2766204320076987	0.4952680699006822	0.4728636899361373	T	T	T
0.3975716200282191	0.1665475997574320	0.5200319609851585	T	T	T
0.8582690442275265	0.3263680627094194	0.5399104719771887	T	T	T
0.8108065278571870	0.3440795289718263	0.4445561394833505	T	T	T
0.7339917519668706	0.9980054555962934	0.4753896643110426	T	T	T
0.9343677349282431	0.6744599023365716	0.5109317052521862	T	T	T
0.5151196542169901	0.7409033995573833	0.4856397565944792	T	T	T
0.1513943669532500	0.9217161249980509	0.5040793194361414	T	T	T

0.2376256122240029	0.2680400074106279	0.4725924249367998	T	T	T
0.4414406288429899	0.3901280225568574	0.5200400486456537	T	T	T
0.4864875270131073	0.5233790763857789	0.4781803582918384	T	T	T
0.1937916452264125	0.1312568214242144	0.5098201635518764	T	T	T
0.6056860563534215	0.0673615027841505	0.5417115154527914	T	T	T
0.0673687576383481	0.6010915333528301	0.4471163114093091	T	T	T
0.0808411773915860	0.8484222255256624	0.5518142490653962	T	T	T
0.5918739323545394	0.8181755239411082	0.4377282647378657	T	T	T
0.7553768090164765	0.5388781857180350	0.5722932678063321	T	T	T
0.8403007198780902	0.0994084706588355	0.4490837916411771	T	T	T
0.9990695136665961	0.4798161798872144	0.4812596936265711	T	T	T
0.6817578778495043	0.1854720337083239	0.5101841740135106	T	T	T
0.3353795601295410	0.5995750753887813	0.5430473962298044	T	T	T
0.3378477213761035	0.0599323193668191	0.4474896533213081	T	T	T
0.0849487274740945	0.0688295739740970	0.5503850613872449	T	T	T
0.5976560331334554	0.5844228323544688	0.4383173270218856	T	T	T
0.6081810845255594	0.8229313617092270	0.5403244566432160	T	T	T
0.0672705332452917	0.8330496668719427	0.4491012049102905	T	T	T
0.5317770381846320	0.9903984160839508	0.4783468473736602	T	T	T
0.1418457953276681	0.6755021356776310	0.5103507094545634	T	T	T
0.0760456243376949	0.3296153083807688	0.5407222251332674	T	T	T
0.6103674181537684	0.3298556915740154	0.4480054071388945	T	T	T
0.8569235104293116	0.0759182084875592	0.5509069433967407	T	T	T
0.8250324035293904	0.5874699273877847	0.4387355516121008	T	T	T
0.5687741420929114	0.6042864918132523	0.5375460069727798	T	T	T
0.1072137032266599	0.0592890388489453	0.4487866680694957	T	T	T
0.8544462836546620	0.5910191963865061	0.5677372148882847	T	T	T
0.0100803701880880	0.6246666048106055	0.5769993425152229	T	T	T

Best + 2

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000  
-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O Pt

56 8 96 2

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F

0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7601455325951396	0.0085525328962147	0.6411928240356974	T	T	T
0.9068963005363966	0.6511647733352761	0.5893411969541400	T	T	T
0.4247044607334610	0.6786235862884850	0.5819077884714504	T	T	T
0.2316384702386010	0.9830843993489723	0.6465677959399730	T	T	T
0.9312917237377188	0.1743376432060558	0.5823480377455352	T	T	T
0.4043223002016585	0.1543994197478935	0.5905357620851116	T	T	T
0.2688467389192141	0.5101766842402634	0.6380393744878929	T	T	T
0.2254715345885040	0.7570072591179003	0.6420579666672384	T	T	T
0.4383134392657273	0.9058415608069116	0.5903423257034125	T	T	T
0.8904865381900628	0.4256020410274747	0.5848962088908607	T	T	T
0.7847799930961050	0.2268754841144701	0.6504355209587201	T	T	T
0.8924477109483996	0.9283709862971101	0.5816615776284141	T	T	T
0.4437961226831366	0.4003710738856687	0.5904228916908943	T	T	T
0.2255862444682475	0.2657067194084862	0.6387802707872693	T	T	T
0.0105509280110168	0.2428808988427527	0.6385892722445683	T	T	T
0.6530810378252062	0.4410022313859479	0.5899045841037218	T	T	T
0.6782647611618421	0.8950743856127712	0.5817848713633000	T	T	T
0.9837958320096294	0.7738033838252062	0.6445826525764117	T	T	T
0.1765820507391296	0.8911447405655893	0.5821769934215506	T	T	T
0.1581078724356105	0.4402360570389621	0.5906437289926164	T	T	T

0.5178180421026248	0.2182627674449353	0.6388673153887622	T	T	T
0.6627144699284058	0.6694445408202426	0.5846140216073660	T	T	T
0.9786063239323227	0.4866554027171683	0.6417971562092287	T	T	T
0.6704059638626091	0.1653468412023067	0.5867315773199099	T	T	T
0.5003483994955567	0.5065864858164988	0.6428737351142715	T	T	T
0.1697032218751832	0.1612909627794039	0.5860474908051502	T	T	T
0.5108675399031162	0.9933518438849771	0.6434355659177108	T	T	T
0.1679043056986317	0.6666313521097662	0.5861012573207500	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7412693862374051	0.4891545338176010	0.6471127464662119	T	T	T
0.7679261638130878	0.7395048118468479	0.6459897375853277	T	T	T
0.4887769986917579	0.7692901848690707	0.6468416146219271	T	T	T
0.9984121829985158	0.9928587758545770	0.6464781126687175	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F

0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8145495942780624	0.8459838174869967	0.6557897728922640	T	T	T
0.8499389996113343	0.8044727817123609	0.5711067617050974	T	T	T
0.2703722602940636	0.7292993666109169	0.5989002689137448	T	T	T
0.3989382174553023	0.9379237330473041	0.6347651142313226	T	T	T
0.7240207273021768	0.5294969413873176	0.6072413027341039	T	T	T
0.9285483669400622	0.1435515929650855	0.6240963298902715	T	T	T
0.4988171609253768	0.2293372687824581	0.5965696168982065	T	T	T
0.1763615805394729	0.4359438536669947	0.6349730411296629	T	T	T
0.3325499958038091	0.8135460520117157	0.6556073292622004	T	T	T
0.3427725686211587	0.8498897423287636	0.5710561158115659	T	T	T
0.0077402023917237	0.2631920782834464	0.5953574739128792	T	T	T
0.6696977444709510	0.3954974289685017	0.6321794322259833	T	T	T
0.7392582580849795	0.7486192008719506	0.6068250096805069	T	T	T
0.9259082226369570	0.9212384334976463	0.6227245292920779	T	T	T
0.2752251245464489	0.4951142745894233	0.5955761128438949	T	T	T
0.3936972689255499	0.1689138482986360	0.6370422026101943	T	T	T
0.8899210265150497	0.4033062994751641	0.6310417772023015	T	T	T
0.8058263173866159	0.3437117491510207	0.5716118236318809	T	T	T
0.7273765122102004	0.0001600454470583	0.5982006148937294	T	T	T
0.9349335006182519	0.6557083285611970	0.6334075414134898	T	T	T
0.5078183178216308	0.7438616171943008	0.6072545515305436	T	T	T
0.1424945656721177	0.9256468738739614	0.6240527574795571	T	T	T
0.2348744297639205	0.2681194398319519	0.5963041841905313	T	T	T
0.4433689370731267	0.3875001200984856	0.6368070042153738	T	T	T

0.4808052963241050	0.5258631281391022	0.6009995729830262	T	T	T
0.1836350972497532	0.1363735214328028	0.6295127804138702	T	T	T
0.6010702981775102	0.0632338022522989	0.6557085105922400	T	T	T
0.0631990024379240	0.6050290330684008	0.5745273547791325	T	T	T
0.0716892312243048	0.8401021187580533	0.6628708315805060	T	T	T
0.5843487174658496	0.8231154120264520	0.5659042235679186	T	T	T
0.8089952384481353	0.5896638585433546	0.6569638272645646	T	T	T
0.8364172071922608	0.0997572385533928	0.5757199936483001	T	T	T
0.9956161151720141	0.4802546350827612	0.5995973474830028	T	T	T
0.6802111700535959	0.1831720275715878	0.6295534396293736	T	T	T
0.3374303706807761	0.5960213240885578	0.6546456458784724	T	T	T
0.3346200397692058	0.0603077230768235	0.5744841921455762	T	T	T
0.0852434300476099	0.0407162919352604	0.6702503355712657	T	T	T
0.5882965094664255	0.5879176865927351	0.5653567448046876	T	T	T
0.6036107829666701	0.8207218346071198	0.6541393940259675	T	T	T
0.0627176418094361	0.8342692016476512	0.5757162448861519	T	T	T
0.5258696604187475	0.9906477691245374	0.6013255320212577	T	T	T
0.1387512550813811	0.6719124437152089	0.6281936370273614	T	T	T
0.0792608081177743	0.3338885782760420	0.6576160527617984	T	T	T
0.6059148921304381	0.3314425435899866	0.5745210845660238	T	T	T
0.8512568097417100	0.0603985099087646	0.6636750057884628	T	T	T
0.8202746546023182	0.5899999352520453	0.5662736219820053	T	T	T
0.5730590470795999	0.6035321521262118	0.6544122794087007	T	T	T
0.1035307095545456	0.0587176618597845	0.5755715005131222	T	T	T
0.9602662774795602	0.1884242485746683	0.6804782510731590	T	T	T
0.7820361762461908	0.3581823269749858	0.6863106967185525	T	T	T

Best + 3

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 37.7150080587397056

In Sn O Pt

56 8 96 2

Selective dynamics

Direct

0.7601355639032334 0.0113491388480114 0.6389314665380326 F F F

0.2398011528578508 0.9865686263342539 0.6496441292015049 F F F

0.7715609358761526 0.2384774583519729 0.6496441292015049 F F F

0.0114274436599118 0.2273539761562873 0.6389314665380326 F F F

0.9885092730793446 0.7705637720692522 0.6496441292015049 F F F

0.9992924867227941 0.4989588874152986 0.6442878065983919 F F F

0.5006104591753910	0.9976863097953554	0.6442878065983919	F	F	F
0.5711050139140639	0.3215061998213713	0.7302137251482463	F	F	F
0.0957725477933451	0.3440739638851937	0.7190771920085552	F	F	F
0.5954026351313857	0.8431342143429106	0.7184445361110789	F	F	F
0.0723481839551638	0.8196467319278042	0.7300196610483383	F	F	F
0.1070672751660240	0.5702693439724342	0.7302137251482463	F	F	F
0.5592186766464877	0.0954719189441917	0.7190771920085552	F	F	F
0.5598634887194152	0.5938629574054701	0.7184445361110789	F	F	F
0.1070866522751501	0.0714678941073643	0.7300196610483383	F	F	F
0.3217673805293373	0.1064662464661481	0.7302137251482463	F	F	F
0.3449483355957312	0.5586839063775031	0.7190771920085552	F	F	F
0.8446059148989562	0.5586868263331084	0.7184445361110789	F	F	F
0.8205048314696768	0.1071269550956586	0.7300196610483383	F	F	F
0.3340699873820370	0.8315250108956107	0.7242646141760360	F	F	F
0.8324703755049825	0.3328596096534895	0.7242646141760360	F	F	F
0.3333132055655028	0.3327453316617905	0.7248359247731742	F	F	F
0.8333317331272525	0.8313056494183115	0.7242646141760360	F	F	F
0.2283757639079198	0.7594403068302924	0.6389314665380326	F	F	F
0.4999683632135756	0.4989588874152986	0.6442878065983919	F	F	F
0.7722030242013673	0.7372048960276700	0.6496441328851290	F	F	F
0.4891851419039881	0.7705637644234216	0.6496441328851290	F	F	F
0.7384831957080280	0.4878411963083735	0.6496441328851290	F	F	F
0.7557518666636864	0.0165510988056752	0.8807011459980104	T	T	T
0.9058784935484246	0.6532184328868091	0.8088574500141159	T	T	T
0.4281377296087183	0.6770785554048266	0.7976383551907475	T	T	T
0.2318743051698673	0.9853894333118534	0.8865670533584501	T	T	T
0.9291799930922647	0.1765892621145925	0.7983028589448674	T	T	T
0.4014014993157923	0.1555795115678331	0.8098429546961978	T	T	T
0.2557664513863334	0.5154783892698861	0.8797421474531831	T	T	T
0.2173678764992648	0.7621184909420774	0.8721281053050335	T	T	T
0.4394430429834856	0.9052353526102396	0.8095276987920559	T	T	T
0.8962271133009754	0.4242803163956213	0.7975274674649951	T	T	T
0.7767289975939181	0.2392324430416308	0.8843469383293434	T	T	T
0.8929808530439304	0.9298598147107161	0.7990069312326402	T	T	T
0.4387419454776782	0.4046952092368751	0.8105276088109256	T	T	T
0.2196902145026795	0.2638795953732985	0.8761474637837398	T	T	T
0.0132920855373684	0.2257711647512362	0.8799509905538777	T	T	T
0.6532200383956382	0.4396130564448207	0.8086218229097369	T	T	T
0.6783726630750446	0.8955922713208839	0.7981400169737447	T	T	T
0.9791435646981892	0.7789821027105022	0.8882733804523949	T	T	T
0.1757772215478621	0.8936383930109910	0.7974055890790793	T	T	T
0.1559547406921135	0.4405894354026235	0.8098094660936362	T	T	T
0.5083249253313586	0.2253369506832973	0.8765535902504445	T	T	T
0.6676272219216909	0.6661164953395035	0.8022357494530354	T	T	T

0.9953481469907568	0.4918547610103246	0.8819211703429565	T	T	T
0.6656947051689953	0.1655059666204730	0.8039714961276484	T	T	T
0.5009172219220490	0.5087150950722441	0.8842093346355716	T	T	T
0.1646369762270256	0.1666781702041630	0.8037894272197861	T	T	T
0.5078789232951457	0.9955059243432965	0.8832463960313262	T	T	T
0.1653404573393736	0.6646393346380325	0.8023326158729078	T	T	T
0.2277336602504292	0.2607128538629411	0.6389314702216780	F	F	F
0.5107516054408165	0.2273539685104495	0.6389314702216780	F	F	F
0.2614535057798690	0.5100765994651582	0.6389314702216780	F	F	F
0.0000021130779260	0.0002314344439824	0.6442877992311082	F	F	F
0.7471368659787176	0.4875108654696582	0.8858270633188829	T	T	T
0.7711895299172673	0.7374280913759734	0.8867481096363447	T	T	T
0.5024640937996695	0.7616181137546357	0.8872041601837320	T	T	T
0.9888912701119660	0.0073965989330172	0.8903115127418145	T	T	T
0.8159621184411563	0.8581513196171642	0.6654559099501753	F	F	F
0.3952972119514584	0.9366022075870006	0.6276595231455957	F	F	F
0.9176889992569386	0.1543852969704318	0.6160765563022039	F	F	F
0.1696015544058724	0.4325678957130350	0.6302162978772969	F	F	F
0.3245524865666596	0.8141206723693344	0.6654559099501753	F	F	F
0.6662187468277452	0.3938441150176502	0.6276595231455957	F	F	F
0.9266414898463324	0.9166133831432433	0.6160765563022039	F	F	F
0.3969660861330055	0.1690672319202733	0.6302162978772969	F	F	F
0.8593569123797522	0.3233549040052850	0.6654559099501753	F	F	F
0.9383551867246638	0.6651398428978581	0.6276595231455957	F	F	F
0.1555405424342524	0.9245750032457849	0.6160765563022039	F	F	F
0.4333710451824828	0.3964989024812127	0.6302162978772969	F	F	F
0.1839746083192395	0.1397664555379237	0.6231196809846153	F	F	F
0.6046395148089374	0.0613155675680872	0.6609160677891879	F	F	F
0.0822477308365634	0.8435324815089373	0.6724990330310092	F	F	F
0.8303351723545234	0.5653498794420528	0.6583592930574795	F	F	F
0.6753841932572655	0.1837971027857606	0.6231196809846153	F	F	F
0.3337179329961870	0.6040736601374377	0.6609160677891879	F	F	F
0.0732951833242197	0.0813043953361117	0.6724990330310092	F	F	F
0.6029705936909266	0.8288505432348146	0.6583592930574795	F	F	F
0.1405798143202901	0.6745628242694224	0.6231196809846153	F	F	F
0.0615815399753714	0.3327778853768564	0.6609160677891879	F	F	F
0.8443961875860566	0.0733427183786404	0.6724990330310092	F	F	F
0.5665656815175595	0.6014188257935018	0.6583592930574795	F	F	F
0.5157056528974664	0.4723168025344222	0.7031710746865940	F	F	F
0.9382179561018660	0.3938357985626055	0.7407554663269664	F	F	F
0.4134789539146055	0.1791020841611726	0.7528988135720383	F	F	F
0.1652751896643423	0.8971290675402415	0.7385849480023765	F	F	F
0.0115883806741621	0.5147326163742747	0.7031710746865940	F	F	F
0.6667554280548842	0.9368543259418871	0.7407554663269664	F	F	F



0.4068903253506875	0.4130228565151839	0.7528988135720383	F	F	F
0.9354551584237285	0.1641872661653920	0.7385849480023765	F	F	F
0.4726453699615192	0.0111632294020509	0.7031710746865940	F	F	F
0.3948988741132311	0.6650179164863772	0.7407554663269664	F	F	F
0.1795706135457422	0.4061412956967914	0.7528988135720383	F	F	F
0.8991418888258949	0.9343893682713826	0.7385849480023765	F	F	F
0.1502554041553523	0.1930157623298641	0.7457436406118987	F	F	F
0.7266437877272409	0.2720664091381622	0.7077767387407548	F	F	F
0.2526127549163633	0.4863993494907461	0.6961638816933373	F	F	F
0.5025216625734217	0.7656930053037172	0.7101169368244840	F	F	F
0.6558603363579962	0.1500934214450282	0.7457436406118987	F	F	F
0.0011556798742944	0.7256778258794370	0.7077767387407548	F	F	F
0.2602591083369674	0.2519335125370645	0.6961638816933373	F	F	F
0.7300562656035439	0.5011895953132282	0.7101169368244840	F	F	F
0.1938240818969916	0.6551493419751111	0.7457436406118987	F	F	F
0.2721399812473635	0.0004733764911151	0.7077767387407548	F	F	F
0.4870674713351235	0.2598722351273111	0.6961638816933373	F	F	F
0.7672940286364280	0.7287924234005558	0.7101169368244840	F	F	F
0.8086764969761415	0.8526857086552334	0.8985438847150107	T	T	T
0.8499225995524874	0.8058360389362013	0.7836912415673164	T	T	T
0.2710825119894082	0.7277962489763350	0.8178051959521579	T	T	T
0.3989848106082494	0.9285360653811133	0.8715854177104728	T	T	T
0.7494304405349975	0.5111501213573716	0.8321308213238101	T	T	T
0.9266264582979989	0.1470139414858167	0.8558150290530199	T	T	T
0.4926122357895304	0.2338292249213502	0.8183795606440393	T	T	T
0.1663873212129023	0.4369418080229178	0.8725325546852870	T	T	T
0.3648030014364669	0.7733113793661652	0.9040525410046180	T	T	T
0.3442836878820040	0.8490102436451336	0.7834497798702167	T	T	T
-0.0005279510710569	0.2701673329827146	0.8208956073523570	T	T	T
0.6640236027334936	0.4024369693451003	0.8683546734233988	T	T	T
0.7397735110404166	0.7463581997986257	0.8327931797607525	T	T	T
0.9272202761331180	0.9267194024356722	0.8576932299730919	T	T	T
0.2703619053001423	0.4963242568451047	0.8195929387186731	T	T	T
0.3884525126999475	0.1698609452297850	0.8736676676860975	T	T	T
0.8510218316522271	0.3344928076456337	0.9000572477040450	T	T	T
0.8054186453970963	0.3430764640517011	0.7833004847035576	T	T	T
0.7289916363262156	-0.0000307783283987	0.8213915323776152	T	T	T
0.9359036936007805	0.6608595635888287	0.8689140380822002	T	T	T
0.5147135318326814	0.7380726173115234	0.8327967011864009	T	T	T
0.1412782112542306	0.9241586869874548	0.8571327375585515	T	T	T
0.2307037327740569	0.2713532329125982	0.8179496766955406	T	T	T
0.4300531280351471	0.3974038293727017	0.8743455673431576	T	T	T
0.4823433689240605	0.5268093744407770	0.8256302043678069	T	T	T
0.1854614514851551	0.1358883700789421	0.8617467543435717	T	T	T

0.5961799181096166	0.0694871727261443	0.8992386918534494	T	T	T
0.0610976037942114	0.6027505702065900	0.7870991576544193	T	T	T
0.0187054490354303	0.8910067261883827	0.9277713292108688	T	T	T
0.5858014929610695	0.8218210343007314	0.7764156893746589	T	T	T
0.8251247723035434	0.5719118068196277	0.8979826297169056	T	T	T
0.8348897885366783	0.1012207464232421	0.7899983520072729	T	T	T
0.9913069588686425	0.4810677109102924	0.8241413287343728	T	T	T
0.6713948433152118	0.1898440378471923	0.8617050496105418	T	T	T
0.2488503840259282	0.5816310660105131	0.9330995991380829	T	T	T
0.3321178037159773	0.0614928150038101	0.7882388064149681	T	T	T
0.0750231972488134	0.0749308898371079	0.9105177575121768	T	T	T
0.5925239637731351	0.5855492535437762	0.7761224758723630	T	T	T
0.6052708100501822	0.8199723762858346	0.8978126029672285	T	T	T
0.0622404172542291	0.8357184419316649	0.7899743730500046	T	T	T
0.5249200182409605	0.9906903884942427	0.8253405990048065	T	T	T
0.1323608002084324	0.6767517745809384	0.8584617180326631	T	T	T
0.0653395154338980	0.3318539830046650	0.8994659239705901	T	T	T
0.6027530295836206	0.3330386977898323	0.7883993995339299	T	T	T
0.8364779743426820	0.0892737312333670	0.9104200929251897	T	T	T
0.8219090297114163	0.5908531788027467	0.7760023189249832	T	T	T
0.5968585344633959	0.6006631729657261	0.8985959041827531	T	T	T
0.1009563667534488	0.0619809168781826	0.7898417195420299	T	T	T
0.3412581445489377	0.6448306544742908	0.9201567775328368	T	T	T
0.1335891841299106	0.7424048875838621	0.9331899492286416	T	T	T

**Pt- Trimer on Indium Tin Oxide ( In order of increasing energy as shown in the SI)**

Best:

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O Pt

56 8 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316 0.0111196284508281 0.4659634855339050 F F F

0.2397990222127078 0.9863352678444528 0.4737760756088107 F F F

0.7715588052310096 0.2382440998621718 0.4737760756088107 F F F

0.0114253481492099 0.2271244657591041 0.4659634855339050 F F F

0.9885071424342016 0.7703304135794511 0.4737760756088107 F F F

0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7604067909070450	0.0143343195027179	0.6413257160218312	T	T	T
0.9068662126506208	0.6513763033792087	0.5891496979237327	T	T	T
0.4257989583544658	0.6756701859750979	0.5827019767817110	T	T	T
0.2298962966642309	0.9839928019694678	0.6446098780834205	T	T	T
0.9286157698699801	0.1763440572306735	0.5825667427102099	T	T	T
0.4045744098126548	0.1557287738439006	0.5909809672967601	T	T	T
0.2642472596225695	0.5146223647747392	0.6378274556023978	T	T	T
0.2235579209753674	0.7595503634058701	0.6416008139084374	T	T	T
0.4403869139941515	0.9043403013247022	0.5894690961136235	T	T	T
0.8940562599071387	0.4248424653310607	0.5821465983850420	T	T	T
0.7717001291690547	0.2398201114674781	0.6496499190427547	T	T	T
0.8905979842799373	0.9304441686200910	0.5816464059345819	T	T	T
0.4421154335177832	0.4013634920822296	0.5907765883333884	T	T	T
0.2249490561747642	0.2630042001884076	0.6386349768755241	T	T	T
0.0168956533548887	0.2209902985200368	0.6406043884242334	T	T	T
0.6532477905679310	0.4399307213653577	0.5901065675932466	T	T	T
0.6791577607414484	0.8935082246381552	0.5816156792919057	T	T	T
0.9822012161745073	0.7816933790736729	0.6447199245448448	T	T	T
0.1761238395052694	0.8914669755086052	0.5817820432851161	T	T	T
0.1566945202186170	0.4407087237273205	0.5903332107202156	T	T	T
0.5169485920939531	0.2234779524583046	0.6426815660049595	T	T	T

0.6664297633092355	0.6646083787450269	0.5861717330184868	T	T	T
0.9968609012812817	0.4912869085883839	0.6425543898920367	T	T	T
0.6664552328738018	0.1654764837680309	0.5867437516447459	T	T	T
0.4997398375212888	0.4916437358297951	0.6467933361663363	T	T	T
0.1655016966332601	0.1661373949271871	0.5859556714366110	T	T	T
0.5164674391909422	0.9920730235611617	0.6423344622238862	T	T	T
0.1660857642273905	0.6677922036775448	0.5859770828136003	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7466589333341146	0.4800587115048924	0.6486078490876585	T	T	T
0.7731740253969821	0.7367928325132620	0.6457249122857420	T	T	T
0.4837615362558213	0.7764000193293340	0.6473040553906692	T	T	T
0.9964203992511942	0.0014067962730700	0.6456995902295829	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F

0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8163972453106429	0.8467131397570222	0.6556988168618335	T	T	T
0.8504388091862259	0.8038123092129711	0.5708485404088489	T	T	T
0.2696531547813998	0.7289703801295656	0.5983859210571162	T	T	T
0.4035009028284575	0.9362183556470686	0.6351887786322684	T	T	T
0.7506385318783755	0.5140043523668339	0.6085350612242575	T	T	T
0.9244486374127110	0.1457818368707194	0.6238151199915130	T	T	T
0.4978189260480702	0.2292638845453002	0.5976652304368236	T	T	T
0.1709355132690109	0.4380485208432371	0.6365681576081150	T	T	T
0.3221399965319212	0.8228618284693909	0.6547812726332412	T	T	T
0.3439879873398833	0.8484098569707273	0.5711301398898574	T	T	T
0.0011741088163173	0.2694846984446944	0.5980522850799607	T	T	T
0.6698813598164108	0.4004663627961724	0.6306503516006172	T	T	T
0.7428170386276798	0.7448036602528000	0.6066192179902686	T	T	T
0.9228470687256493	0.9282142416218141	0.6228903789041647	T	T	T
0.2696330337755832	0.4974458029582887	0.5953959244829417	T	T	T
0.3933178441351400	0.1682423528873184	0.6370919284224966	T	T	T
0.8621588091280907	0.3275619177308921	0.6537620604198232	T	T	T
0.8054962131199623	0.3441443575274576	0.5710446290323969	T	T	T
0.7275084461986407	0.9986247943042147	0.5979182512799842	T	T	T
0.9388727963651553	0.6601535539140084	0.6327023820508761	T	T	T
0.5103299948756193	0.7420193958668253	0.6074305228421492	T	T	T
0.1391928471940484	0.9265288631118277	0.6225196303838064	T	T	T
0.2327354769250514	0.2711308606233661	0.5963533615313419	T	T	T
0.4310274943295802	0.3928954847721544	0.6336930709802814	T	T	T
0.4822988061876340	0.5251488336179287	0.6025685464897723	T	T	T

0.1890921248352474	0.1345108594464703	0.6281491717686477	T	T	T
0.6055504087085394	0.0582207632870181	0.6544333940859323	T	T	T
0.0620938204276646	0.6040714687504614	0.5742542250793577	T	T	T
0.0695904708712738	0.8497097180841983	0.6626032682085043	T	T	T
0.5879556692998918	0.8179401281465284	0.5659175933502928	T	T	T
0.8276561915106774	0.5754282211455770	0.6546809289336367	T	T	T
0.8346881354667905	0.1011696431604806	0.5755335848830042	T	T	T
0.9934183966868193	0.4794699751450509	0.6006219642955234	T	T	T
0.6782063426098749	0.1843255850971099	0.6282433815948247	T	T	T
0.3307225420987733	0.6000994153299078	0.6548156495576536	T	T	T
0.3326651591445364	0.0621868046295755	0.5747718574957452	T	T	T
0.0769169192961438	0.0717446089793109	0.6629994062203142	T	T	T
0.5912274940759172	0.5861572723815086	0.5662070313034625	T	T	T
0.6123389718298234	0.8231536039445878	0.6527748940903256	T	T	T
0.0613228335767581	0.8346761606743452	0.5755691830777027	T	T	T
0.5255207978504554	0.9892253084452143	0.6002807275201433	T	T	T
0.1346747681917163	0.6764241130361026	0.6280368013187756	T	T	T
0.0699145354356371	0.3302968268088631	0.6545970042533253	T	T	T
0.6045266290418408	0.3322971143510080	0.5742489796426468	T	T	T
0.8507630798048126	0.0734819191264168	0.6636959390908330	T	T	T
0.8208610516910821	0.5899927550645712	0.5658976146601120	T	T	T
0.5305432769767936	0.2651197157397429	0.6823218586242135	T	T	T
0.1015378355693657	0.0618619766078097	0.5756695656193783	T	T	T
0.6967399329800383	0.4366175034025291	0.6964830895540443	T	T	T
0.6045080179770884	0.3399628602978553	0.6839802262139397	T	T	T
0.5732038048756283	0.6061672901331510	0.6725544373970003	T	T	T

Best + 1

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O Pt

56 8 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316 0.0111196284508281 0.4659634855339050 F F F

0.2397990222127078 0.9863352678444528 0.4737760756088107 F F F

0.7715588052310096 0.2382440998621718 0.4737760756088107 F F F

0.0114253481492099 0.2271244657591041 0.4659634855339050 F F F

0.9885071424342016 0.7703304135794511 0.4737760756088107 F F F

0.9992903736448469 0.4987274529686729 0.4698697869370179 F F F

0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7592661032469747	0.0157626325032337	0.6414121394692089	T	T	T
0.9073091577061960	0.6519925395941293	0.5892047323385335	T	T	T
0.4251892739211172	0.6764037067817367	0.5827014561903430	T	T	T
0.2302605243469267	0.9821739619835758	0.6464093969368064	T	T	T
0.9284823608709072	0.1764688277966877	0.5827848073262496	T	T	T
0.4040590658130435	0.1567970304318593	0.5910688975252051	T	T	T
0.2618237044984799	0.5160408407813905	0.6383101797104338	T	T	T
0.2125530288815423	0.7636809183823363	0.6413632925696743	T	T	T
0.4403886703264128	0.9053932951017590	0.5891276512367798	T	T	T
0.8956867975820801	0.4242421208073427	0.5820400455591950	T	T	T
0.7689904807825814	0.2416573392804880	0.6502763534823509	T	T	T
0.8903324242256451	0.9311224056696215	0.5816327483505700	T	T	T
0.4406430323822750	0.3998614892509439	0.5905477375324599	T	T	T
0.2235751903209552	0.2624811371405418	0.6390380075270883	T	T	T
0.0152587044563478	0.2221389509946585	0.6414858761208743	T	T	T
0.6539976211818301	0.4395724137397788	0.5891235547905852	T	T	T
0.6787710737430227	0.8943909839993380	0.5818607605986276	T	T	T
0.9788275548575307	0.7842209628150930	0.6447327885241515	T	T	T
0.1758067628611944	0.8922888198541385	0.5819914405253344	T	T	T
0.1566242184960820	0.4404991928374274	0.5904081266353080	T	T	T
0.5189088420111519	0.2256510917006060	0.6440673121046699	T	T	T
0.6691796195135419	0.6644226817125150	0.5855866839009224	T	T	T

0.9976844375464357	0.4911352944242790	0.6427445123978949	T	T	T
0.6659022312839252	0.1658234328874442	0.5867764400488873	T	T	T
0.5004187673777364	0.4899579600274536	0.6440776480476300	T	T	T
0.1653919618242552	0.1656422855872035	0.5863610994517966	T	T	T
0.5098837409812118	0.0003806165819475	0.6430788905740273	T	T	T
0.1658658534551649	0.6679765994414109	0.5858134012359919	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7502285472544369	0.4781119659402558	0.6479105227301064	T	T	T
0.7779902444866242	0.7349826322741660	0.6459675387516950	T	T	T
0.5037064068134102	0.7804033222353104	0.6468319328857730	T	T	T
0.9937663253879435	0.0041643527247833	0.6462417611559113	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F



0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8145366221120649	0.8494887285091764	0.6556734585645494	T	T	T
0.8500743750940661	0.8048274801877043	0.5710340094023711	T	T	T
0.2690834401214631	0.7298194999696171	0.5987352848597305	T	T	T
0.3994096156176198	0.9355588043954960	0.6361540920524110	T	T	T
0.7514147185334636	0.5142536849274426	0.6081426215283011	T	T	T
0.9236151594004158	0.1486260049001334	0.6243862478502052	T	T	T
0.4975648211271391	0.2297624719688127	0.5981668833447480	T	T	T
0.1704572760360712	0.4379389377313503	0.6366778005437275	T	T	T
0.3044957263331097	0.8202870402845692	0.6614546271598185	T	T	T
0.3451218610319770	0.8472945278910005	0.5714664713206945	T	T	T
0.0006639146250075	0.2695912959496780	0.5985431828369564	T	T	T
0.6729454854002712	0.3996982148123606	0.6292768019601243	T	T	T
0.7426552619391178	0.7456281402958816	0.6069041351316820	T	T	T
0.9221450539207524	0.9307923889567832	0.6227863625621490	T	T	T
0.2690546555545539	0.4984007644212756	0.5956457884921961	T	T	T
0.3919981345892942	0.1715292978682676	0.6377021704821236	T	T	T
0.8596939036442712	0.3275910298141736	0.6565487486383156	T	T	T
0.8063337520290831	0.3436791183659801	0.5708767146460991	T	T	T
0.7270981745352318	0.9993737376276326	0.5979674274508328	T	T	T
0.9399248020179101	0.6606491234194951	0.6326295999769602	T	T	T
0.5172167900863077	0.7420584893963440	0.6079564383260256	T	T	T
0.1406602119444886	0.9273252934186385	0.6232146220635197	T	T	T
0.2323487365395315	0.2707814295993997	0.5967240518290844	T	T	T
0.4274337002782550	0.3938391310432994	0.6338400427573736	T	T	T
0.4812234427914457	0.5249961210207289	0.6019493712740742	T	T	T
0.1885503718856931	0.1334455940929290	0.6287621875233318	T	T	T

0.6047509907560646	0.0601717456017807	0.6548624667939879	T	T	T
0.0623039535946259	0.6040814344102126	0.5742068351180748	T	T	T
0.0627028035084658	0.8528863246643523	0.6631527730310213	T	T	T
0.5877949821848000	0.8190286957019565	0.5658901183850730	T	T	T
0.8285649945192346	0.5735122821978421	0.6544170932077963	T	T	T
0.8343841872451162	0.1018120185569813	0.5756265267657342	T	T	T
0.9935167631893893	0.4798546010978780	0.6006921504264243	T	T	T
0.6779267979131466	0.1856749020156424	0.6282534748100261	T	T	T
0.3263249245071443	0.6055521896442250	0.6559604985511935	T	T	T
0.3325043857313340	0.0624280739841232	0.5747789787208708	T	T	T
0.0754926032514669	0.0722146383358547	0.6637873390801631	T	T	T
0.5904010586167274	0.5876656783828146	0.5662911117507142	T	T	T
0.6131467519295517	0.8260592470811453	0.6535302781593653	T	T	T
0.0614719138630446	0.8354246129943721	0.5757257567567512	T	T	T
0.5244101847854695	0.9894070306221812	0.6011422040055129	T	T	T
0.1320906210877471	0.6768312278866757	0.6279400019448483	T	T	T
0.0687663743403556	0.3306348275969714	0.6549346501236429	T	T	T
0.6035016552757425	0.3326604935269425	0.5741798331911949	T	T	T
0.8483858600117722	0.0757387067038825	0.6639076021371184	T	T	T
0.8223243871447872	0.5899882075515871	0.5657477786895998	T	T	T
0.5482529340205605	0.2609446384350643	0.6835280541623285	T	T	T
0.1012322698761319	0.0619490004775036	0.5757707688118388	T	T	T
0.6145564866595430	0.5215665821465616	0.6845604167524023	T	T	T
0.5963403261998594	0.3588846388432227	0.6827596254549698	T	T	T
0.4390013096427657	0.6762523546375037	0.6691273873291129	T	T	T

Best + 2

In Sn O Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O Pt

56 8 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F

0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7601091614056088	0.0121638659646308	0.6417704910713127	T	T	T
0.9074926979235514	0.6516963567650933	0.5893112330941861	T	T	T
0.4250162997550504	0.6768622981258829	0.5826148919984604	T	T	T
0.2325225376287534	0.9827378924692809	0.6450917169540631	T	T	T
0.9294743235793490	0.1757445216478430	0.5827010779196797	T	T	T
0.4035216480606607	0.1544335242058423	0.5906373273519918	T	T	T
0.2633327665681264	0.5138384321235492	0.6383312791842428	T	T	T
0.2256013205076783	0.7582875429276896	0.6415908020549921	T	T	T
0.4402045441844393	0.9038470091854549	0.5903197504685807	T	T	T
0.8956005849812954	0.4243831177974684	0.5820141358316278	T	T	T
0.7704911046975056	0.2567564848458090	0.6453859477843906	T	T	T
0.8921769480808734	0.9293744031025355	0.5818810168049353	T	T	T
0.4423830793269019	0.4014322403236790	0.5905495159148941	T	T	T
0.2251334326188754	0.2621121062471872	0.6391132208372241	T	T	T
0.0154444583137376	0.2247326775610929	0.6417386070646955	T	T	T
0.6516580990705947	0.4423448624712876	0.5890354588354683	T	T	T
0.6789567174418849	0.8942992172031978	0.5816466618737337	T	T	T
0.9832146272798070	0.7824564780649652	0.6450251322100868	T	T	T
0.1761572689509663	0.8915893889559143	0.5819585823413504	T	T	T
0.1569830863387196	0.4395940203202997	0.5904281132615097	T	T	T
0.5191232564905874	0.2185812245879717	0.6392171916797196	T	T	T
0.6662872707069738	0.6669673076648550	0.5853899362804711	T	T	T
0.9980001913628911	0.4923000348419038	0.6430433513293607	T	T	T

0.6688640635555885	0.1639468858760580	0.5862988284275019	T	T	T
0.4983498167158942	0.4919769293226608	0.6463334105459140	T	T	T
0.1654526349579157	0.1654667432781736	0.5862280148607084	T	T	T
0.5157150137505937	0.9922883783580190	0.6429763113340172	T	T	T
0.1671775383843510	0.6666572626815608	0.5860565046272228	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7428590211542740	0.4964236055426241	0.6466944703843964	T	T	T
0.7730014867250929	0.7397200888223026	0.6455742984605735	T	T	T
0.4890554216238954	0.7694841026494146	0.6481556384874594	T	T	T
0.9994828113937757	0.9988354508328072	0.6469321064716738	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F

0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8156825349758066	0.8484482800085829	0.6558354018492523	T	T	T
0.8502996727197853	0.8048097750389331	0.5710665946203548	T	T	T
0.2697654541209502	0.7291678808825566	0.5985810614751088	T	T	T
0.4060480562825788	0.9326090082473115	0.6356777909136611	T	T	T
0.7489472345443531	0.5173130326900903	0.6070925339679007	T	T	T
0.9215078903521885	0.1472864966848633	0.6254787042438466	T	T	T
0.4983482485236621	0.2290035081441388	0.5967035130065170	T	T	T
0.1714970092185695	0.4370132576674806	0.6367301242806249	T	T	T
0.3256510558487591	0.8197649931058990	0.6550347397687872	T	T	T
0.3441384201971402	0.8485079686520720	0.5712708213435533	T	T	T
0.0002598277324708	0.2682722865352929	0.5986962784880063	T	T	T
0.6634221088020738	0.4096952880978506	0.6300028015278514	T	T	T
0.7420737832700652	0.7460834741931848	0.6065464657449766	T	T	T
0.9236572539319852	0.9316629293121252	0.6234273961956021	T	T	T
0.2724078406791577	0.4946633601218480	0.5960422145285378	T	T	T
0.3946804846495127	0.1676113094015150	0.6370160976764581	T	T	T
0.8564724809484474	0.3461733821568984	0.6522074207893596	T	T	T
0.8057539063037069	0.3437864399357977	0.5712875803637658	T	T	T
0.7286046902207488	0.9981654127088291	0.5985798901637622	T	T	T
0.9388984872150417	0.6622248294294764	0.6326147126686195	T	T	T
0.5118965044211237	0.7396238571576603	0.6079347543899090	T	T	T
0.1403906785753080	0.9273576682835127	0.6230267894835535	T	T	T
0.2329192198985837	0.2700252280949300	0.5967231475077597	T	T	T
0.4362145516438432	0.3866585249960011	0.6359288123446944	T	T	T
0.4799448714548475	0.5251755857816960	0.6024622869839718	T	T	T
0.1887161990045314	0.1341967341633961	0.6286321088943581	T	T	T
0.6022334751631888	0.0646038950392693	0.6558733004780919	T	T	T

0.0633820702001984	0.6030187991138121	0.5744681646124974	T	T	T
0.0738276682430055	0.8470710161821415	0.6631009687306886	T	T	T
0.5859055311929424	0.8204429769902504	0.5660473823872110	T	T	T
0.8269861346064573	0.5799793752723374	0.6545407829873326	T	T	T
0.8362159759698713	0.1004309290965892	0.5757757474912424	T	T	T
0.9931409103760203	0.4794649607272845	0.6009757604898169	T	T	T
0.6828427488281008	0.1821909254251963	0.6281934192292908	T	T	T
0.3317954949440676	0.5977365876049561	0.6549080346433840	T	T	T
0.3328563973480527	0.0607395792492511	0.5748794892480547	T	T	T
0.0766782307510212	0.0727862142558990	0.6635218573318511	T	T	T
0.5901410904630708	0.5878409043782753	0.5660649215216225	T	T	T
0.6122138281945126	0.8241783128325508	0.6533704282379844	T	T	T
0.0618808957887182	0.8343440980852108	0.5757938516473970	T	T	T
0.5262159090962797	0.9898130343701581	0.6009111208552369	T	T	T
0.1356706787415334	0.6761261035947399	0.6280615231217581	T	T	T
0.0703195282091613	0.3305890236097042	0.6553081289450304	T	T	T
0.6053940004858021	0.3317573812303252	0.5744397945904538	T	T	T
0.8611893176865308	0.0380250366649761	0.6695702688125920	T	T	T
0.8218318340802284	0.5906089343535044	0.5657665935082932	T	T	T
0.6077361168122621	0.4895762917662410	0.7027479915083319	T	T	T
0.1009096480981029	0.0617908874909716	0.5758239987062268	T	T	T
0.7737172202422613	0.1765933681229086	0.6884181077206364	T	T	T
0.6248718338997961	0.3605920934981981	0.6908444643619092	T	T	T
0.5758316004619601	0.5943360582341981	0.6749596835078719	T	T	T

Best + 3

1.0000000000000000

14.6581653332033461	0.0000000000000000	0.0000000000000000
7.3189795989957736	12.7095316657975506	0.0000000000000000
-0.0098891034462902	-0.0168642175486257	51.7150080587397056

In Sn O Pt

56 8 96 3

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F

0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7595108275883931	0.0183837066067198	0.6410608798858917	T	T	T
0.9063926963652307	0.6524309893163363	0.5901607064103445	T	T	T
0.4257163604954854	0.6755499267189009	0.5823244788363127	T	T	T
0.2327059452771394	0.9818445125734243	0.6450219325028641	T	T	T
0.9309241113569868	0.1763900431713381	0.5817778859741907	T	T	T
0.4042971275922582	0.1533418336391534	0.5905080915872176	T	T	T
0.2624900129185690	0.5143697057031034	0.6381931694231184	T	T	T
0.2217645128137846	0.7586156603038745	0.6410773072822309	T	T	T
0.4402924234279126	0.9050309055568135	0.5902116236723458	T	T	T
0.8980811649872606	0.4244966252738394	0.5822978031251154	T	T	T
0.7847465602204906	0.2320249255184734	0.6450027205429478	T	T	T
0.8916496823903088	0.9299561607879099	0.5816814344924097	T	T	T
0.4416126817010522	0.4031390611292736	0.5905113757814107	T	T	T
0.2227967314658486	0.2613089047852313	0.6382173450356916	T	T	T
0.0192996958428040	0.2205362305604623	0.6411315750596387	T	T	T
0.6537257808383501	0.4394767630265264	0.5902503907213799	T	T	T
0.6766012211860613	0.8967471192600911	0.5822800033160860	T	T	T
0.9829533171944078	0.7839823737878930	0.6448335274167647	T	T	T
0.1772321888163972	0.8905659118307554	0.5817114888010764	T	T	T
0.1548617621330948	0.4400362377461704	0.5904989807041687	T	T	T
0.5153082906651534	0.2219208549742930	0.6381739258577994	T	T	T
0.6667978260141538	0.6657591322775716	0.5863763767253403	T	T	T
0.0089322010751403	0.4917539403671043	0.6466678820215890	T	T	T
0.6679798299219044	0.1653395440473489	0.5858300873429272	T	T	T
0.4930699250667772	0.4980183442443362	0.6467246288714250	T	T	T

0.1665044917473395	0.1645122325605968	0.5858491163387853	T	T	T
0.4988066163765339	0.0079702574405047	0.6466619453107967	T	T	T
0.1659022937083421	0.6666272270622073	0.5858084090811104	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7489033364955802	0.4749926378503773	0.6467761624841373	T	T	T
0.7762936695480391	0.7474029759209415	0.6466570703681924	T	T	T
0.4757449070272912	0.7754633088601608	0.6467861693707562	T	T	T
0.0000288356301326	0.9993591866384506	0.6460580278343926	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F



0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8168625688950470	0.8576981101441206	0.6554914544735624	T	T	T
0.8486265833434530	0.8048461501972852	0.5715068344667174	T	T	T
0.2704826061966514	0.7269337308169312	0.5983435179751666	T	T	T
0.3991652158443273	0.9336970119495263	0.6330519200249256	T	T	T
0.7513235317142843	0.5111286134238711	0.6082116729027121	T	T	T
0.9318759918357884	0.1429555515364953	0.6230527976365821	T	T	T
0.4966549691627336	0.2311423374947381	0.5959317451394384	T	T	T
0.1754661141819795	0.4340708816712393	0.6364925934343972	T	T	T
0.3249550114898625	0.8157835742305011	0.6558479812715632	T	T	T
0.3454385504980735	0.8473454225390427	0.5713481176233728	T	T	T
0.0017342802500266	0.2693826023729784	0.5983072248442198	T	T	T
0.6665169154133395	0.3986873089845133	0.6330331949975587	T	T	T
0.7373640948711753	0.7501165484204080	0.6081554965887221	T	T	T
0.9248421655791645	0.9312721740260343	0.6229526469777440	T	T	T
0.2716152004547894	0.4952161829746231	0.5959890688785379	T	T	T
0.3899122722948576	0.1741846881853562	0.6363527662507167	T	T	T
0.8588602952226978	0.3242373297997005	0.6557153664012887	T	T	T
0.8060374399292201	0.3442544954466342	0.5714898764350664	T	T	T
0.7278608748210758	0.0007936812130680	0.5982870258798627	T	T	T
0.9349912586361313	0.6653354676716674	0.6328391550380275	T	T	T
0.5117499527449141	0.7366699867945670	0.6082204516368321	T	T	T
0.1434213910124384	0.9243843157840956	0.6229436756552573	T	T	T
0.2324834602252110	0.2699600100339410	0.5959795287851364	T	T	T
0.4355112332842097	0.3890417732048945	0.6363003414832704	T	T	T
0.4839531196425497	0.5246732070121141	0.6034227474956211	T	T	T
0.1907089185095003	0.1313001110748075	0.6278071442836861	T	T	T
0.6020067869037362	0.0712486906593597	0.6544371320163478	T	T	T
0.0617443741012451	0.6029429115674745	0.5745045649591560	T	T	T
0.0716356943763898	0.8494045556269398	0.6630923302965925	T	T	T

0.5870017213843184	0.8199812864477707	0.5666762549645057	T	T	T
0.9462562989413712	0.5398409501233417	0.6841486920286926	T	T	T
0.8357467456639895	0.1013477257950299	0.5757177884667328	T	T	T
0.9914862312721269	0.4823614132571379	0.6033544420193024	T	T	T
0.6773489595471318	0.1899040569198576	0.6277359081921219	T	T	T
0.3267532015129859	0.6012010513750070	0.6544194230203146	T	T	T
0.3343657371715238	0.0602284579031149	0.5744916124639019	T	T	T
0.0785444952219763	0.0705196889927322	0.6632009515283386	T	T	T
0.5918332569051259	0.5862454137841837	0.5666103045683641	T	T	T
0.5144712562922251	0.9448297729586983	0.6840995693152436	T	T	T
0.0619069827704450	0.8343395043660067	0.5757684890312831	T	T	T
0.5255536364151965	0.9896243633480424	0.6034369269007627	T	T	T
0.1325144010502086	0.6761595431716501	0.6277503624805760	T	T	T
0.0717914131755535	0.3255344060621965	0.6543990961744299	T	T	T
0.6045897312393009	0.3330704811213039	0.5745725856133390	T	T	T
0.8502068407241765	0.0779263223879667	0.6631683659556487	T	T	T
0.8214397991465034	0.5905570367866844	0.5665914799471210	T	T	T
0.5425076378246132	0.5139356247794922	0.6839140511569894	T	T	T
0.1023523520122183	0.0609160496173260	0.5756570390896272	T	T	T
0.7981828728264375	0.5932629729101251	0.6741591939214757	T	T	T
0.5952272819909368	0.6094594136836520	0.6740968106135554	T	T	T
0.6093097560747225	0.7970284311171341	0.6741012435197078	T	T	T

**Pt- Monomer on 4-H<sub>2</sub>O Indium Tin Oxide ( In order of increasing energy as shown in the SI)**

Best :

In Sn O Pt H

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O Pt H

56 8 100 1 8

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316 0.0111196284508281 0.4659634855339050 F F F

0.2397990222127078 0.9863352678444528 0.4737760756088107 F F F

0.7715588052310096 0.2382440998621718 0.4737760756088107 F F F

0.0114253481492099 0.2271244657591041 0.4659634855339050 F F F

0.9885071424342016 0.7703304135794511 0.4737760756088107 F F F

0.9992903736448469 0.4987274529686729 0.4698697869370179 F F F

0.5006083460974438 0.9974548753487298 0.4698697869370179 F F F

0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7649032234369665	0.0025607083983826	0.6410507747781887	T	T	T
0.9068143041073075	0.6507785807897660	0.5892888135556283	T	T	T
0.4276118559751774	0.6785204339438208	0.5816094863077381	T	T	T
0.9282283765398277	0.1773785779055135	0.5820613268016085	T	T	T
0.4056709311100876	0.1530149098617854	0.5908168930041965	T	T	T
0.2318343869671846	0.7567647619711840	0.6384780715785644	T	T	T
0.4407457772645191	0.9044462118770462	0.5902199687352826	T	T	T
0.8950564374651701	0.4244476266289479	0.5820228140333581	T	T	T
0.7681461092571641	0.2513268610098664	0.6453085748211813	T	T	T
0.8952836825166836	0.9272077454434495	0.5822233066239555	T	T	T
0.4375819034581621	0.4015282106427829	0.5913311088282901	T	T	T
0.2254425553016372	0.2564127612779566	0.6390580517147947	T	T	T
0.0124986333488333	0.2270342631089033	0.6415422023739304	T	T	T
0.6506503526210107	0.4408158599038011	0.5894517155658019	T	T	T
0.6793796361682266	0.8930757581098235	0.5819979001268671	T	T	T
0.1775451106223701	0.8926240815590220	0.5817805847081623	T	T	T
0.1579399496721920	0.4379385285160202	0.5906236655763488	T	T	T
0.5177894426783313	0.2224609900998384	0.6409925855465060	T	T	T
0.6664186407994922	0.6665098394376954	0.5860569799951783	T	T	T
0.0009749042136640	0.4882405773117366	0.6433006329370362	T	T	T
0.6686780038121906	0.1633965181057749	0.5866957336463076	T	T	T
0.4865030670100042	0.5112416697660793	0.6424207965064822	T	T	T
0.1661197044907798	0.1647143520252232	0.5861727144895926	T	T	T

0.5054592762964319	0.9964062659065818	0.6444200031987865	T	T	T
0.1678671052495096	0.6658229566167498	0.5852536314318638	T	T	T
0.2381844422802071	0.9888298324776331	0.6492579570035153	T	T	T
0.2467707700534491	0.5235079149240839	0.6414737307803561	T	T	T
0.9954467580156086	0.7610834122178616	0.6484623410408390	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7360650424396989	0.4965131003127193	0.6465459100935489	T	T	T
0.7795075901574715	0.7354365803020675	0.6468770422773010	T	T	T
0.4785243943875937	0.7694947065661922	0.6483420486783504	T	T	T
0.0011689906188182	0.0026747594867805	0.6434416403216165	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F

0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8321331772694220	0.8438904039441750	0.6571098896045670	T	T	T
0.8507793673928119	0.8040656912280898	0.5710463922300836	T	T	T
0.2726544690330466	0.7281625016757460	0.5968368914932510	T	T	T
0.4026447234764778	0.9306855069815481	0.6320614956643323	T	T	T
0.7458978287128293	0.5132088271429286	0.6069973124202335	T	T	T
0.9180638663177264	0.1493595782372285	0.6243168189213150	T	T	T
0.4990147990514187	0.2286475227791318	0.5976723521708797	T	T	T
0.1727010689357501	0.4296726490304396	0.6354060815737779	T	T	T
0.3259474669142181	0.8144362131485765	0.6547625188795883	T	T	T
0.3445408007493543	0.8498951262635929	0.5709396411033325	T	T	T
0.9995163233162618	0.2687652175746965	0.5985494877727205	T	T	T
0.6545928882329701	0.4089469899775086	0.6324419964330267	T	T	T
0.7415501705739170	0.7466120575410961	0.6070921086993788	T	T	T
0.9340996828029627	0.9237593761096424	0.6244536818696450	T	T	T
0.2679928084115860	0.4980867094149533	0.5977467101039001	T	T	T
0.3946796638112826	0.1680379683817996	0.6372679643702753	T	T	T
0.8493760107475173	0.3400592454624329	0.6537121051853647	T	T	T
0.8045987873752970	0.3436490669936481	0.5711915780190662	T	T	T
0.7328380925901178	0.9953854277624306	0.5986126773222133	T	T	T
0.9363559651739278	0.6577127069301908	0.6320347713655362	T	T	T
0.5124162411173969	0.7374395792439312	0.6081403701328745	T	T	T
0.1460586566643897	0.9250478428802634	0.6236440774056586	T	T	T
0.2351609816116900	0.2672430413404574	0.5964781142440485	T	T	T
0.4327916483970174	0.3930900273778401	0.6363203830618043	T	T	T
0.4771925979002870	0.5268831566579107	0.6002627026022457	T	T	T
0.1836245348642952	0.1351282822866160	0.6279485049178409	T	T	T
0.6056542909461755	0.0593233422481706	0.6547240322897516	T	T	T

0.0627177457499293	0.6028354366320602	0.5743695136680409	T	T	T
0.0797047007219157	0.8493201148944890	0.6650216277161313	T	T	T
0.5863902027178800	0.8196347043465864	0.5661303152306687	T	T	T
0.8322209455275020	0.5654753925447830	0.6537760179794285	T	T	T
0.8362198190417821	0.0996862933505199	0.5758830667899315	T	T	T
0.9943042245684284	0.4774796287885708	0.6007887148243766	T	T	T
0.6855805967545485	0.1769524518352983	0.6291513921217372	T	T	T
0.3275556743519739	0.6021633584480693	0.6555275458162479	T	T	T
0.3338736859547615	0.0607510619948706	0.5745636454637176	T	T	T
0.0710382229592591	0.0736706477217439	0.6631939686480719	T	T	T
0.5919497032642463	0.5866722819520590	0.5658880389232629	T	T	T
0.4703973352321940	0.8375193235425276	0.6886889482148562	T	T	T
0.0633626716847342	0.8351197253720546	0.5755858610067464	T	T	T
0.5278987411691713	0.9897326905497287	0.6017683956498079	T	T	T
0.1352452133834879	0.6876694206445729	0.6260258615405669	T	T	T
0.0712109429227966	0.3275756400549213	0.6562017195513271	T	T	T
0.6031616216709333	0.3312239599487654	0.5749465044849587	T	T	T
0.8650502657261134	0.0447888558113807	0.6664882074664352	T	T	T
0.8210882243087413	0.5900610084347941	0.5659603776528606	T	T	T
0.5649884463066756	0.6042785634476657	0.6544649999739693	T	T	T
0.1000647493948705	0.0621964483046242	0.5758467053283448	T	T	T
0.1007326858014815	0.6125209528492815	0.6706076946347099	T	T	T
0.3112469633560560	0.0294274168429234	0.6798820186815562	T	T	T
0.5483745672795232	0.2380519336725616	0.6844091343817121	T	T	T
0.7261615288642315	0.2374566082873327	0.6845867413435920	T	T	T
0.6070523604476465	0.8145935777963953	0.6712151120004781	T	T	T
0.8318355452441673	0.1022975071087069	0.6794752965569248	T	T	T
0.1173231032513955	0.6171473230409978	0.6886318888074016	T	T	T
0.0872224132105914	0.8554598365390429	0.6835887312994002	T	T	T
0.2646399198354751	0.0627289323011849	0.6945566377755427	T	T	T
0.4095907908192665	0.9132326386008330	0.6874868431630070	T	T	T
0.6154784509376892	0.2437760058735848	0.6859450062667404	T	T	T
0.5735207478706984	0.1629171174028724	0.6873677366382772	T	T	T
0.7398225857971238	0.2812453066272232	0.6963052640869730	T	T	T

Best + 1

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 37.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 1

Selective dynamics

Direct

0.7601355639032334	0.0113491388480114	0.6389314665380326	F	F	F
0.2398011528578508	0.9865686263342539	0.6496441292015049	F	F	F
0.7715609358761526	0.2384774583519729	0.6496441292015049	F	F	F
0.0114274436599118	0.2273539761562873	0.6389314665380326	F	F	F
0.9885092730793446	0.7705637720692522	0.6496441292015049	F	F	F
0.9992924867227941	0.4989588874152986	0.6442878065983919	F	F	F
0.5006104591753910	0.9976863097953554	0.6442878065983919	F	F	F
0.5711050139140639	0.3215061998213713	0.7302137251482463	F	F	F
0.0957725477933451	0.3440739638851937	0.7190771920085552	F	F	F
0.5954026351313857	0.8431342143429106	0.7184445361110789	F	F	F
0.0723481839551638	0.8196467319278042	0.7300196610483383	F	F	F
0.1070672751660240	0.5702693439724342	0.7302137251482463	F	F	F
0.5592186766464877	0.0954719189441917	0.7190771920085552	F	F	F
0.5598634887194152	0.5938629574054701	0.7184445361110789	F	F	F
0.1070866522751501	0.0714678941073643	0.7300196610483383	F	F	F
0.3217673805293373	0.1064662464661481	0.7302137251482463	F	F	F
0.3449483355957312	0.5586839063775031	0.7190771920085552	F	F	F
0.8446059148989562	0.5586868263331084	0.7184445361110789	F	F	F
0.8205048314696768	0.1071269550956586	0.7300196610483383	F	F	F
0.3340699873820370	0.8315250108956107	0.7242646141760360	F	F	F
0.8324703755049825	0.3328596096534895	0.7242646141760360	F	F	F
0.3333132055655028	0.3327453316617905	0.7248359247731742	F	F	F
0.8333317331272525	0.8313056494183115	0.7242646141760360	F	F	F
0.2283757639079198	0.7594403068302924	0.6389314665380326	F	F	F
0.4999683632135756	0.4989588874152986	0.6442878065983919	F	F	F
0.7722030242013673	0.7372048960276700	0.6496441328851290	F	F	F
0.4891851419039881	0.7705637644234216	0.6496441328851290	F	F	F
0.7384831957080280	0.4878411963083735	0.6496441328851290	F	F	F
0.7622365911974296	0.0053850992726895	0.8800391170067945	T	T	T
0.9077230769323323	0.6505804820473907	0.8068519354989639	T	T	T
0.4247094021846239	0.6800275719863283	0.8011399183327799	T	T	T
0.9272301861312651	0.1779629290079505	0.7980917048345653	T	T	T
0.4026479701369405	0.1548969800692222	0.8102521809686198	T	T	T
0.2375295342063675	0.7630389693980558	0.8782483801249247	T	T	T
0.4408435760057881	0.9043730626566023	0.8083877368980511	T	T	T
0.8967977947351123	0.4263628098889672	0.7978083865759119	T	T	T
0.7678040745131957	0.2414151212926242	0.8898620527424806	T	T	T
0.8928023483399798	0.9264246653756244	0.7982428723532323	T	T	T
0.4412595695289438	0.3996914188535987	0.8095750446761527	T	T	T
0.2255107682544380	0.2502654307056104	0.8799404581530236	T	T	T
0.0038675377007773	0.2406560114963635	0.8770084497197845	T	T	T
0.6533190432028085	0.4387718479503606	0.8073129956974616	T	T	T

0.6787402343971335	0.8937499063881874	0.7975020310948366	T	T	T
0.1739402916753170	0.8946901326172466	0.7984130693882188	T	T	T
0.157287424777353	0.4353683513676745	0.8105227191894301	T	T	T
0.5146989286065394	0.2210872026576732	0.8776512794492743	T	T	T
0.6678139313617566	0.6657165965121100	0.8012004405745539	T	T	T
0.0049001031566596	0.5015552602190042	0.8851887178319343	T	T	T
0.6685985902989322	0.1631290424651285	0.8045156720173524	T	T	T
0.4966491888051629	0.5165675029167465	0.8795894353689939	T	T	T
0.1652671308754023	0.1649638990732566	0.8036924191191396	T	T	T
0.5098792969607558	0.9899668355406708	0.8813358251871853	T	T	T
0.1655583644191906	0.6668593391380687	0.8041458970357551	T	T	T
0.2437305824773322	0.0045506985859969	0.8955891789799858	T	T	T
0.2651474997985432	0.5070398856945623	0.8767017938935345	T	T	T
0.9898614852326009	0.7579919590064200	0.8894051235516007	T	T	T
0.2277336602504292	0.2607128538629411	0.6389314702216780	F	F	F
0.5107516054408165	0.2273539685104495	0.6389314702216780	F	F	F
0.2614535057798690	0.5100765994651582	0.6389314702216780	F	F	F
0.0000021130779260	0.0002314344439824	0.6442877992311082	F	F	F
0.7439566086844516	0.4895086420257281	0.8851646937887070	T	T	T
0.7698563753679258	0.7364605773680543	0.8846446591492254	T	T	T
0.4917095504385614	0.7595857864587838	0.8862494794434784	T	T	T
0.9908669889307267	0.0023677103891598	0.8817952272855216	T	T	T
0.8159621184411563	0.8581513196171642	0.6654559099501753	F	F	F
0.3952972119514584	0.9366022075870006	0.6276595231455957	F	F	F
0.9176889992569386	0.1543852969704318	0.6160765563022039	F	F	F
0.1696015544058724	0.4325678957130350	0.6302162978772969	F	F	F
0.3245524865666596	0.8141206723693344	0.6654559099501753	F	F	F
0.6662187468277452	0.3938441150176502	0.6276595231455957	F	F	F
0.9266414898463324	0.9166133831432433	0.6160765563022039	F	F	F
0.3969660861330055	0.1690672319202733	0.6302162978772969	F	F	F
0.8593569123797522	0.3233549040052850	0.6654559099501753	F	F	F
0.9383551867246638	0.6651398428978581	0.6276595231455957	F	F	F
0.1555405424342524	0.9245750032457849	0.6160765563022039	F	F	F
0.4333710451824828	0.3964989024812127	0.6302162978772969	F	F	F
0.1839746083192395	0.1397664555379237	0.6231196809846153	F	F	F
0.6046395148089374	0.0613155675680872	0.6609160677891879	F	F	F
0.0822477308365634	0.8435324815089373	0.6724990330310092	F	F	F
0.8303351723545234	0.5653498794420528	0.6583592930574795	F	F	F
0.6753841932572655	0.1837971027857606	0.6231196809846153	F	F	F
0.3337179329961870	0.6040736601374377	0.6609160677891879	F	F	F
0.0732951833242197	0.0813043953361117	0.6724990330310092	F	F	F
0.6029705936909266	0.8288505432348146	0.6583592930574795	F	F	F
0.1405798143202901	0.6745628242694224	0.6231196809846153	F	F	F
0.0615815399753714	0.3327778853768564	0.6609160677891879	F	F	F



0.8443961875860566	0.0733427183786404	0.6724990330310092	F	F	F
0.5665656815175595	0.6014188257935018	0.6583592930574795	F	F	F
0.5157056528974664	0.4723168025344222	0.7031710746865940	F	F	F
0.9382179561018660	0.3938357985626055	0.7407554663269664	F	F	F
0.4134789539146055	0.1791020841611726	0.7528988135720383	F	F	F
0.1652751896643423	0.8971290675402415	0.7385849480023765	F	F	F
0.0115883806741621	0.5147326163742747	0.7031710746865940	F	F	F
0.6667554280548842	0.9368543259418871	0.7407554663269664	F	F	F
0.4068903253506875	0.4130228565151839	0.7528988135720383	F	F	F
0.9354551584237285	0.1641872661653920	0.7385849480023765	F	F	F
0.4726453699615192	0.0111632294020509	0.7031710746865940	F	F	F
0.3948988741132311	0.6650179164863772	0.7407554663269664	F	F	F
0.1795706135457422	0.4061412956967914	0.7528988135720383	F	F	F
0.8991418888258949	0.9343893682713826	0.7385849480023765	F	F	F
0.1502554041553523	0.1930157623298641	0.7457436406118987	F	F	F
0.7266437877272409	0.2720664091381622	0.7077767387407548	F	F	F
0.2526127549163633	0.4863993494907461	0.6961638816933373	F	F	F
0.5025216625734217	0.7656930053037172	0.7101169368244840	F	F	F
0.6558603363579962	0.1500934214450282	0.7457436406118987	F	F	F
0.0011556798742944	0.7256778258794370	0.7077767387407548	F	F	F
0.2602591083369674	0.2519335125370645	0.6961638816933373	F	F	F
0.7300562656035439	0.5011895953132282	0.7101169368244840	F	F	F
0.1938240818969916	0.6551493419751111	0.7457436406118987	F	F	F
0.2721399812473635	0.0004733764911151	0.7077767387407548	F	F	F
0.4870674713351235	0.2598722351273111	0.6961638816933373	F	F	F
0.7672940286364280	0.7287924234005558	0.7101169368244840	F	F	F
0.8180916939369417	0.8420475439033981	0.9013825805389369	T	T	T
0.8500402386933502	0.8038034087606976	0.7823813726228482	T	T	T
0.2625226837122055	0.7339958392678202	0.8180694513674611	T	T	T
0.4009910848698602	0.9297973419804141	0.8675972194149499	T	T	T
0.7505458413462170	0.5122295245168674	0.8316692852287541	T	T	T
0.9240755225581126	0.1511346398192109	0.8561310731862123	T	T	T
0.4977910295868838	0.2293777175445561	0.8184700270908127	T	T	T
0.1800055405120947	0.4253535412521146	0.8730959767969718	T	T	T
0.4058945857077364	0.6857290969938843	0.8681661790829758	T	T	T
0.3431861583872873	0.8495763005045383	0.7836420904890332	T	T	T
0.9981887184081557	0.2717796137791018	0.8190622227136278	T	T	T
0.6632692943170536	0.4046174396176921	0.8655445278796744	T	T	T
0.7387130139153751	0.7471976203322427	0.8310913899114541	T	T	T
0.9318234766186870	0.9137404849787105	0.8564056576851625	T	T	T
0.2693138548035015	0.4960599082935841	0.8183731546305471	T	T	T
0.3966887090498998	0.1657299413339382	0.8709653258967281	T	T	T
0.8482775944615624	0.3373473853837204	0.9005432561060327	T	T	T
0.8061226633220586	0.3438039717769941	0.7827740473936596	T	T	T

0.7311980313308826	0.9962027866241289	0.8210307489927581	T	T	T
0.9326716450720692	0.6645997345933516	0.8625096288808148	T	T	T
0.5225881503387086	0.7411429718078826	0.8317901267232801	T	T	T
0.1401390610712227	0.9285871587453687	0.8585170945237073	T	T	T
0.2318641963693192	0.2663068560552421	0.8197736886721021	T	T	T
0.4381329050195066	0.3972707890822959	0.8703743133161000	T	T	T
0.4815084363055984	0.5213300258229898	0.8211192407624091	T	T	T
0.1718782372321008	0.1369365558037557	0.8608726121848124	T	T	T
0.6035871046933571	0.0557626398014169	0.8976825468375584	T	T	T
0.0649301381771315	0.6018514161866401	0.7879186330149200	T	T	T
0.0612862204160485	0.8534089929179024	0.9144756480641892	T	T	T
0.5868551389624150	0.8205888284803210	0.7749278699559230	T	T	T
0.8251304883172429	0.5748054261133224	0.8964260297413759	T	T	T
0.8368483735642428	0.0987199061341462	0.7899925084839517	T	T	T
0.9946787058576748	0.4791532666112209	0.8253648720537242	T	T	T
0.6782823146384488	0.1808686384170839	0.8623022148288124	T	T	T
0.3376036325839975	0.5774769866643187	0.9113734380168461	T	T	T
0.3320788166819226	0.0616008684963472	0.7878640483201182	T	T	T
0.0615027984804709	0.0833361019050252	0.9130270528536273	T	T	T
0.5909996790483275	0.5866094049745526	0.7760066561997701	T	T	T
0.6044985017446001	0.8147418960835793	0.8965558771070791	T	T	T
0.0606503456215220	0.8353525343885936	0.7898039138234643	T	T	T
0.5265939751371093	0.9892777491902539	0.8235809043707563	T	T	T
0.1505598233613740	0.6770680845966981	0.8656274601443177	T	T	T
0.0630094601370634	0.3378078818583780	0.8988778056948553	T	T	T
0.6070618033170065	0.3281553195249124	0.7874930762702660	T	T	T
0.8519571501510516	0.0717697918117919	0.9092725014117214	T	T	T
0.8229381763165050	0.5900056428279077	0.7752915169471118	T	T	T
0.5935616277513263	0.5952878785554707	0.9013288907304216	T	T	T
0.0991616023684720	0.0623538152442598	0.7896595810012839	T	T	T
0.6589993700544049	0.3039669472262649	0.9345267859733680	T	T	T
0.0428791048904310	0.6073963213485016	0.9216173476520518	T	T	T
0.2790644659194636	0.1207928164673029	0.9222559544250022	T	T	T
0.5231281493044054	0.2493844358670229	0.9358622051254482	T	T	T
0.6943515718542230	0.2982659744739751	0.9569156173038358	T	T	T
0.0303496302691892	0.6100191113814500	0.9470638903292725	T	T	T
0.2521178765549831	0.1421011755732577	0.9462320002122226	T	T	T
0.5835082148804293	0.2716995324802241	0.9373879098976154	T	T	T
0.5574285246906026	0.1749614015202940	0.9426715424429591	T	T	T
0.0605281854640663	0.8625664647685317	0.9401334875162656	T	T	T
0.0423798256602650	0.0941141802771474	0.9380955706620225	T	T	T
0.3430474138296603	0.5566394674202715	0.9362098952997490	T	T	T
0.3244026832689650	0.8292953571609645	0.9297885022421867	T	T	T

Best + 2

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 37.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 1

Selective dynamics

Direct

0.7601355639032334 0.0113491388480114 0.6389314665380326 F F F

0.2398011528578508 0.9865686263342539 0.6496441292015049 F F F

0.7715609358761526 0.2384774583519729 0.6496441292015049 F F F

0.0114274436599118 0.2273539761562873 0.6389314665380326 F F F

0.9885092730793446 0.7705637720692522 0.6496441292015049 F F F

0.9992924867227941 0.4989588874152986 0.6442878065983919 F F F

0.5006104591753910 0.9976863097953554 0.6442878065983919 F F F

0.5711050139140639 0.3215061998213713 0.7302137251482463 F F F

0.0957725477933451 0.3440739638851937 0.7190771920085552 F F F

0.5954026351313857 0.8431342143429106 0.7184445361110789 F F F

0.0723481839551638 0.8196467319278042 0.7300196610483383 F F F

0.1070672751660240 0.5702693439724342 0.7302137251482463 F F F

0.5592186766464877 0.0954719189441917 0.7190771920085552 F F F

0.5598634887194152 0.5938629574054701 0.7184445361110789 F F F

0.1070866522751501 0.0714678941073643 0.7300196610483383 F F F

0.3217673805293373 0.1064662464661481 0.7302137251482463 F F F

0.3449483355957312 0.5586839063775031 0.7190771920085552 F F F

0.8446059148989562 0.5586868263331084 0.7184445361110789 F F F

0.8205048314696768 0.1071269550956586 0.7300196610483383 F F F

0.3340699873820370 0.8315250108956107 0.7242646141760360 F F F

0.8324703755049825 0.3328596096534895 0.7242646141760360 F F F

0.3333132055655028 0.3327453316617905 0.7248359247731742 F F F

0.8333317331272525 0.8313056494183115 0.7242646141760360 F F F

0.2283757639079198 0.7594403068302924 0.6389314665380326 F F F

0.4999683632135756 0.4989588874152986 0.6442878065983919 F F F

0.7722030242013673 0.7372048960276700 0.6496441328851290 F F F

0.4891851419039881 0.7705637644234216 0.6496441328851290 F F F

0.7384831957080280 0.4878411963083735 0.6496441328851290 F F F

0.7611287312946142 0.9999649381470125 0.8789041472353021 T T T

0.9080491804427171 0.6500406935912875 0.8069324307721554 T T T

0.4240758713873161 0.6826385288088306 0.8014261844963423 T T T

0.9275983126364753 0.1765211696326361 0.7981992611404312 T T T

0.4028086053534162 0.1556720836760592 0.8102321284491529 T T T

0.2427222238732800	0.7522024596811432	0.8782232816313429	T	T	T
0.4416007488112912	0.9056011859470355	0.8079238280348907	T	T	T
0.8969649545139422	0.4251625313718755	0.7980129979024727	T	T	T
0.7629619789738052	0.2569051318961492	0.8832686929522630	T	T	T
0.8933338944390860	0.9260492050360396	0.7980286215830282	T	T	T
0.4404576783878563	0.3995986353124960	0.8098957000483701	T	T	T
0.2259476067039190	0.2503634273146650	0.8802421860851267	T	T	T
0.0044424349344902	0.2405734503631674	0.8776856732343763	T	T	T
0.6503320857156406	0.4420139460559617	0.8070570503686763	T	T	T
0.6785619982387912	0.8936830270001178	0.7972072686381794	T	T	T
0.1750421982744542	0.8927807369756928	0.7986746483164631	T	T	T
0.1576425725844358	0.4349510155452656	0.8107403763850107	T	T	T
0.5160102696517965	0.2226560164014710	0.8777868864206649	T	T	T
0.6687556664786152	0.6665611207928677	0.8004208382783535	T	T	T
0.0061743372741466	0.5012796222741562	0.8855032845516092	T	T	T
0.6687910508524834	0.1626532566246039	0.8042133429551931	T	T	T
0.4824258247252767	0.5310256040461849	0.8787900585502537	T	T	T
0.1654085405179582	0.1639729818635784	0.8039628106436060	T	T	T
0.5074780533320894	0.9934706392623294	0.8812376406734481	T	T	T
0.1637820395032965	0.6665275315363727	0.8039059175470999	T	T	T
0.2452614356269538	0.0015908431116511	0.8956264687218974	T	T	T
0.2640817874058527	0.5105179245696537	0.8769125023190907	T	T	T
0.9885012221589754	0.7569025153002309	0.8893010424464958	T	T	T
0.2277336602504292	0.2607128538629411	0.6389314702216780	F	F	F
0.5107516054408165	0.2273539685104495	0.6389314702216780	F	F	F
0.2614535057798690	0.5100765994651582	0.6389314702216780	F	F	F
0.0000021130779260	0.0002314344439824	0.6442877992311082	F	F	F
0.7386691652123382	0.4993831507956595	0.8849470832221106	T	T	T
0.7684197784055413	0.7368586025731358	0.8842584337706999	T	T	T
0.4912439470519389	0.7659960337338839	0.8854401079337740	T	T	T
0.9974832990184166	0.9945940634684006	0.8825220488788128	T	T	T
0.8159621184411563	0.8581513196171642	0.6654559099501753	F	F	F
0.3952972119514584	0.9366022075870006	0.6276595231455957	F	F	F
0.9176889992569386	0.1543852969704318	0.6160765563022039	F	F	F
0.1696015544058724	0.4325678957130350	0.6302162978772969	F	F	F
0.3245524865666596	0.8141206723693344	0.6654559099501753	F	F	F
0.6662187468277452	0.3938441150176502	0.6276595231455957	F	F	F
0.9266414898463324	0.9166133831432433	0.6160765563022039	F	F	F
0.3969660861330055	0.1690672319202733	0.6302162978772969	F	F	F
0.8593569123797522	0.3233549040052850	0.6654559099501753	F	F	F
0.9383551867246638	0.6651398428978581	0.6276595231455957	F	F	F
0.1555405424342524	0.9245750032457849	0.6160765563022039	F	F	F
0.4333710451824828	0.3964989024812127	0.6302162978772969	F	F	F
0.1839746083192395	0.1397664555379237	0.6231196809846153	F	F	F

0.6046395148089374	0.0613155675680872	0.6609160677891879	F	F	F
0.0822477308365634	0.8435324815089373	0.6724990330310092	F	F	F
0.8303351723545234	0.5653498794420528	0.6583592930574795	F	F	F
0.6753841932572655	0.1837971027857606	0.6231196809846153	F	F	F
0.3337179329961870	0.6040736601374377	0.6609160677891879	F	F	F
0.0732951833242197	0.0813043953361117	0.6724990330310092	F	F	F
0.6029705936909266	0.8288505432348146	0.6583592930574795	F	F	F
0.1405798143202901	0.6745628242694224	0.6231196809846153	F	F	F
0.0615815399753714	0.3327778853768564	0.6609160677891879	F	F	F
0.8443961875860566	0.0733427183786404	0.6724990330310092	F	F	F
0.5665656815175595	0.6014188257935018	0.6583592930574795	F	F	F
0.5157056528974664	0.4723168025344222	0.7031710746865940	F	F	F
0.9382179561018660	0.3938357985626055	0.7407554663269664	F	F	F
0.4134789539146055	0.1791020841611726	0.7528988135720383	F	F	F
0.1652751896643423	0.8971290675402415	0.7385849480023765	F	F	F
0.0115883806741621	0.5147326163742747	0.7031710746865940	F	F	F
0.6667554280548842	0.9368543259418871	0.7407554663269664	F	F	F
0.4068903253506875	0.4130228565151839	0.7528988135720383	F	F	F
0.9354551584237285	0.1641872661653920	0.7385849480023765	F	F	F
0.4726453699615192	0.0111632294020509	0.7031710746865940	F	F	F
0.3948988741132311	0.6650179164863772	0.7407554663269664	F	F	F
0.1795706135457422	0.4061412956967914	0.7528988135720383	F	F	F
0.8991418888258949	0.9343893682713826	0.7385849480023765	F	F	F
0.1502554041553523	0.1930157623298641	0.7457436406118987	F	F	F
0.7266437877272409	0.2720664091381622	0.7077767387407548	F	F	F
0.2526127549163633	0.4863993494907461	0.6961638816933373	F	F	F
0.5025216625734217	0.7656930053037172	0.7101169368244840	F	F	F
0.6558603363579962	0.1500934214450282	0.7457436406118987	F	F	F
0.0011556798742944	0.7256778258794370	0.7077767387407548	F	F	F
0.2602591083369674	0.2519335125370645	0.6961638816933373	F	F	F
0.7300562656035439	0.5011895953132282	0.7101169368244840	F	F	F
0.1938240818969916	0.6551493419751111	0.7457436406118987	F	F	F
0.2721399812473635	0.0004733764911151	0.7077767387407548	F	F	F
0.4870674713351235	0.2598722351273111	0.6961638816933373	F	F	F
0.7672940286364280	0.7287924234005558	0.7101169368244840	F	F	F
0.8161955824535416	0.8406975766961612	0.9013243634465838	T	T	T
0.8503507935745368	0.8037078771894804	0.7824368880357925	T	T	T
0.2621068877672821	0.7312645135438274	0.8172657775733219	T	T	T
0.4004460928648151	0.9338264641087369	0.8669891937860474	T	T	T
0.7484996644701224	0.5139526095983045	0.8312988190517641	T	T	T
0.9215851973510526	0.1473978426214471	0.8585314574208668	T	T	T
0.5002308199514190	0.2276427517128613	0.8185827644589850	T	T	T
0.1805568398715101	0.4256021709465282	0.8732415650878481	T	T	T
0.4065296644082740	0.6995674632203271	0.8636527258538120	T	T	T

0.3434213855132866	0.8500620280629853	0.7837145368907869	T	T	T
0.9971537255924445	0.2691462271329586	0.8196817718392883	T	T	T
0.6520718992638996	0.4169454582784300	0.8668805521361660	T	T	T
0.7394104247551289	0.7476611573576015	0.8307913236261611	T	T	T
0.9293735308083401	0.9165206479241074	0.8567112513434594	T	T	T
0.2690796048720370	0.4951641299437772	0.8182419239311010	T	T	T
0.3971111661331060	0.1679738594819558	0.8712047163624025	T	T	T
0.8448300864599481	0.3449285824687502	0.8976041048263176	T	T	T
0.8052122406047595	0.3438045280292219	0.7832708392057324	T	T	T
0.7310506361994268	0.9957826464197445	0.8206725382900498	T	T	T
0.9297972730940062	0.6635723559944777	0.8629137568417357	T	T	T
0.5284043692719156	0.7460809011200692	0.8315206382438608	T	T	T
0.1451663355517224	0.9240428754162606	0.8591005323246218	T	T	T
0.2316028982693643	0.2655037640022482	0.8200631874327229	T	T	T
0.4391675620339978	0.3929589821199062	0.8705932581944223	T	T	T
0.4789712989687883	0.5228987420546755	0.8204426900736762	T	T	T
0.1711321737047785	0.1359972343322807	0.8614696799779373	T	T	T
0.6031797275218652	0.0567831528673148	0.8980017778128263	T	T	T
0.0641462243888413	0.6009058888927276	0.7876028246262340	T	T	T
0.0661274794900606	0.8476970737080953	0.9140900066499842	T	T	T
0.5870320186635261	0.8214989411133548	0.7744205834725326	T	T	T
0.8228780929729802	0.5780590908432096	0.8975564953535230	T	T	T
0.8370158683122045	0.0984664594557564	0.7901926729261144	T	T	T
0.9946025316957273	0.4778203902861030	0.8256980400463831	T	T	T
0.6856762297232483	0.1756598107726306	0.8627953718491739	T	T	T
0.3291384669730399	0.5930544055978709	0.9034810607045025	T	T	T
0.3320732996631665	0.0622635935992146	0.7878252742843747	T	T	T
0.0605842093567709	0.0787924260807132	0.9141432801879719	T	T	T
0.5898469860403076	0.5886689979760462	0.7759899851533324	T	T	T
0.6044623395457382	0.8195551704562658	0.8965391292798263	T	T	T
0.0601325917527398	0.8362508119592121	0.7895401138558045	T	T	T
0.5270848211636587	0.9905869754254163	0.8235633950420007	T	T	T
0.1396643133799199	0.6804841717998962	0.8628946134980658	T	T	T
0.0633860751801441	0.3377474227635550	0.8991693168872152	T	T	T
0.6071479648721104	0.3282446743388149	0.7879931422993656	T	T	T
0.8639567603144930	0.0363527564097976	0.9151573436025993	T	T	T
0.8238861447219099	0.5891259312437369	0.7753400102919322	T	T	T
0.5893386545585945	0.6040196389160415	0.9015152538133149	T	T	T
0.0991617353196345	0.0614488946324247	0.7899585565972236	T	T	T
0.7293686697618196	0.2323028456847390	0.9369086884037319	T	T	T
0.0394373168311671	0.6092003299562384	0.9217805746691166	T	T	T
0.2812115999357998	0.1187974853999155	0.9218492205831819	T	T	T
0.5497166811995059	0.2283560489699876	0.9377279865206319	T	T	T
0.8251801762526146	0.1032212417501838	0.9291339952692724	T	T	T

0.7431024432500050	0.2748848274561189	0.9535163721087394	T	T	T
0.0385676042978485	0.6066856055522103	0.9475633605976834	T	T	T
0.2608341349729073	0.1373856297873559	0.9465159754011286	T	T	T
0.6147383061360997	0.2361772511959523	0.9397679449892036	T	T	T
0.5775191457473254	0.1514321289299685	0.9383432550944525	T	T	T
0.0623633992052631	0.8579666412652095	0.9397346122818021	T	T	T
0.0465878152471940	0.0850676019651614	0.9396101657516513	T	T	T
0.3293774308231453	0.8273940738074150	0.9300698811719791	T	T	T

Best + 3

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 37.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 1

Selective dynamics

Direct

0.7601355639032334	0.0113491388480114	0.6389314665380326	F	F	F
0.2398011528578508	0.9865686263342539	0.6496441292015049	F	F	F
0.7715609358761526	0.2384774583519729	0.6496441292015049	F	F	F
0.0114274436599118	0.2273539761562873	0.6389314665380326	F	F	F
0.9885092730793446	0.7705637720692522	0.6496441292015049	F	F	F
0.9992924867227941	0.4989588874152986	0.6442878065983919	F	F	F
0.5006104591753910	0.9976863097953554	0.6442878065983919	F	F	F
0.5711050139140639	0.3215061998213713	0.7302137251482463	F	F	F
0.0957725477933451	0.3440739638851937	0.7190771920085552	F	F	F
0.5954026351313857	0.8431342143429106	0.7184445361110789	F	F	F
0.0723481839551638	0.8196467319278042	0.7300196610483383	F	F	F
0.1070672751660240	0.5702693439724342	0.7302137251482463	F	F	F
0.5592186766464877	0.0954719189441917	0.7190771920085552	F	F	F
0.5598634887194152	0.5938629574054701	0.7184445361110789	F	F	F
0.1070866522751501	0.0714678941073643	0.7300196610483383	F	F	F
0.3217673805293373	0.1064662464661481	0.7302137251482463	F	F	F
0.3449483355957312	0.5586839063775031	0.7190771920085552	F	F	F
0.8446059148989562	0.5586868263331084	0.7184445361110789	F	F	F
0.8205048314696768	0.1071269550956586	0.7300196610483383	F	F	F
0.3340699873820370	0.8315250108956107	0.7242646141760360	F	F	F
0.8324703755049825	0.3328596096534895	0.7242646141760360	F	F	F
0.3333132055655028	0.3327453316617905	0.7248359247731742	F	F	F
0.8333317331272525	0.8313056494183115	0.7242646141760360	F	F	F
0.2283757639079198	0.7594403068302924	0.6389314665380326	F	F	F

0.4999683632135756	0.4989588874152986	0.6442878065983919	F	F	F
0.7722030242013673	0.7372048960276700	0.6496441328851290	F	F	F
0.4891851419039881	0.7705637644234216	0.6496441328851290	F	F	F
0.7384831957080280	0.4878411963083735	0.6496441328851290	F	F	F
0.7608607628312644	0.9994253483705225	0.8789498154524052	T	T	T
0.9075936719486898	0.6496945080968766	0.8067619204185492	T	T	T
0.4236858742849378	0.6823020095808772	0.8014216186982247	T	T	T
0.9274052555749264	0.1762734345292586	0.7982268351853397	T	T	T
0.4026091762206900	0.1553294856448283	0.8102411487612970	T	T	T
0.2418950603906459	0.7513100358064142	0.8782776522288143	T	T	T
0.4411803417780182	0.9054568279646221	0.8079865617662352	T	T	T
0.8964147264484031	0.4248533716269218	0.7980008614159895	T	T	T
0.7627358357278992	0.2560343093784125	0.8836215188437790	T	T	T
0.8929979388262524	0.9257544087988187	0.7980476603536713	T	T	T
0.4403466312927568	0.3990238782425066	0.8098616502238142	T	T	T
0.2253657889995125	0.2503300152869284	0.8801828870246188	T	T	T
0.0040490040563607	0.2400068356048529	0.8777248179803268	T	T	T
0.6500082037921245	0.4416562998295805	0.8070488480474208	T	T	T
0.6782336792978094	0.8934198479582159	0.7971791525500335	T	T	T
0.1748733209650638	0.8922418549739562	0.7986890059844575	T	T	T
0.1570924341575725	0.4345089921780971	0.8106336835997729	T	T	T
0.5159138739396435	0.2219432476653676	0.8777189340573018	T	T	T
0.6681396357907526	0.6664592835894998	0.8004129102959038	T	T	T
0.0049513378097277	0.5008997490278670	0.8853531530127657	T	T	T
0.6687482078493270	0.1622243184055108	0.8042039011045538	T	T	T
0.4821689160476495	0.5303423265945703	0.8787479767374580	T	T	T
0.1651560087472567	0.1635586266403141	0.8040011653032366	T	T	T
0.5070210389188882	0.9931000554895590	0.8813133244579603	T	T	T
0.1634222982130880	0.6659801672183737	0.8038473774759055	T	T	T
0.2450324600593885	0.0014400314306036	0.8958074802328365	T	T	T
0.2637139899315674	0.5095122238795717	0.8766793292112268	T	T	T
0.9877829931836980	0.7559554685637415	0.8891693101010691	T	T	T
0.2277336602504292	0.2607128538629411	0.6389314702216780	F	F	F
0.5107516054408165	0.2273539685104495	0.6389314702216780	F	F	F
0.2614535057798690	0.5100765994651582	0.6389314702216780	F	F	F
0.0000021130779260	0.0002314344439824	0.6442877992311082	F	F	F
0.7381074689401291	0.4986103174838710	0.8849108995444932	T	T	T
0.7674887405418128	0.7365137405098242	0.8841723619380922	T	T	T
0.4903534021810629	0.7655115968648919	0.8854343312514419	T	T	T
0.9972025986040166	0.9940465957212617	0.8824080783598433	T	T	T
0.8159621184411563	0.8581513196171642	0.6654559099501753	F	F	F
0.3952972119514584	0.9366022075870006	0.6276595231455957	F	F	F
0.9176889992569386	0.1543852969704318	0.6160765563022039	F	F	F
0.1696015544058724	0.4325678957130350	0.6302162978772969	F	F	F



0.3245524865666596	0.8141206723693344	0.6654559099501753	F	F	F
0.6662187468277452	0.3938441150176502	0.6276595231455957	F	F	F
0.9266414898463324	0.9166133831432433	0.6160765563022039	F	F	F
0.3969660861330055	0.1690672319202733	0.6302162978772969	F	F	F
0.8593569123797522	0.3233549040052850	0.6654559099501753	F	F	F
0.9383551867246638	0.6651398428978581	0.6276595231455957	F	F	F
0.1555405424342524	0.9245750032457849	0.6160765563022039	F	F	F
0.4333710451824828	0.3964989024812127	0.6302162978772969	F	F	F
0.1839746083192395	0.1397664555379237	0.6231196809846153	F	F	F
0.6046395148089374	0.0613155675680872	0.6609160677891879	F	F	F
0.0822477308365634	0.8435324815089373	0.6724990330310092	F	F	F
0.8303351723545234	0.5653498794420528	0.6583592930574795	F	F	F
0.6753841932572655	0.1837971027857606	0.6231196809846153	F	F	F
0.3337179329961870	0.6040736601374377	0.6609160677891879	F	F	F
0.0732951833242197	0.0813043953361117	0.6724990330310092	F	F	F
0.6029705936909266	0.8288505432348146	0.6583592930574795	F	F	F
0.1405798143202901	0.6745628242694224	0.6231196809846153	F	F	F
0.0615815399753714	0.3327778853768564	0.6609160677891879	F	F	F
0.8443961875860566	0.0733427183786404	0.6724990330310092	F	F	F
0.5665656815175595	0.6014188257935018	0.6583592930574795	F	F	F
0.5157056528974664	0.4723168025344222	0.7031710746865940	F	F	F
0.9382179561018660	0.3938357985626055	0.7407554663269664	F	F	F
0.4134789539146055	0.1791020841611726	0.7528988135720383	F	F	F
0.1652751896643423	0.8971290675402415	0.7385849480023765	F	F	F
0.0115883806741621	0.5147326163742747	0.7031710746865940	F	F	F
0.6667554280548842	0.9368543259418871	0.7407554663269664	F	F	F
0.4068903253506875	0.4130228565151839	0.7528988135720383	F	F	F
0.9354551584237285	0.1641872661653920	0.7385849480023765	F	F	F
0.4726453699615192	0.0111632294020509	0.7031710746865940	F	F	F
0.3948988741132311	0.6650179164863772	0.7407554663269664	F	F	F
0.1795706135457422	0.4061412956967914	0.7528988135720383	F	F	F
0.8991418888258949	0.9343893682713826	0.7385849480023765	F	F	F
0.1502554041553523	0.1930157623298641	0.7457436406118987	F	F	F
0.7266437877272409	0.2720664091381622	0.7077767387407548	F	F	F
0.2526127549163633	0.4863993494907461	0.6961638816933373	F	F	F
0.5025216625734217	0.7656930053037172	0.7101169368244840	F	F	F
0.6558603363579962	0.1500934214450282	0.7457436406118987	F	F	F
0.0011556798742944	0.7256778258794370	0.7077767387407548	F	F	F
0.2602591083369674	0.2519335125370645	0.6961638816933373	F	F	F
0.7300562656035439	0.5011895953132282	0.7101169368244840	F	F	F
0.1938240818969916	0.6551493419751111	0.7457436406118987	F	F	F
0.2721399812473635	0.0004733764911151	0.7077767387407548	F	F	F
0.4870674713351235	0.2598722351273111	0.6961638816933373	F	F	F
0.7672940286364280	0.7287924234005558	0.7101169368244840	F	F	F

0.8155671705976841	0.8401988333484499	0.9012574831905984	T	T	T
0.8502149612186850	0.8033438067608745	0.7823791236716753	T	T	T
0.2618224680777629	0.7304261526756141	0.8172694234487705	T	T	T
0.3998246360414893	0.9334765033315692	0.8670622347461640	T	T	T
0.7476949709311280	0.5135634007690952	0.8312703205619072	T	T	T
0.9213404120983555	0.1471242448011498	0.8585662421305829	T	T	T
0.5002994280290582	0.2270057455741565	0.8184938505058920	T	T	T
0.1793316768112020	0.4255459675735793	0.8730262033037617	T	T	T
0.4055754079577976	0.6991708162391309	0.8636121175175631	T	T	T
0.3431320731832411	0.8499449084380742	0.7836779685133687	T	T	T
0.9968671838020113	0.2688237601844848	0.8197351269851519	T	T	T
0.6519228868120278	0.4154412901698050	0.8667795583748507	T	T	T
0.7385761299032254	0.7475959144090454	0.8306847686217143	T	T	T
0.9290429625367754	0.9157265555557945	0.8567300629825664	T	T	T
0.2688110715652545	0.4942767885505171	0.8179961123444673	T	T	T
0.3967671261454609	0.1676771111596989	0.8711632423929374	T	T	T
0.8443735794945086	0.3443180147997455	0.8976508203080278	T	T	T
0.8049923301939128	0.3435572805767487	0.7832590466156605	T	T	T
0.7307178325238767	0.9954427806543000	0.8206482228143269	T	T	T
0.9285558113133304	0.6633146228448841	0.8627119843970085	T	T	T
0.5274870536899336	0.7459806141762545	0.8314980870169614	T	T	T
0.1446924666313772	0.9228638097650489	0.8589707283891218	T	T	T
0.2312092699523014	0.2650759923607732	0.8200930429310082	T	T	T
0.4387182416790099	0.3920241308691418	0.8704070780767194	T	T	T
0.4786626202415006	0.5224741373663149	0.8204490266934550	T	T	T
0.1707118749235452	0.1355573314954213	0.8615234895722581	T	T	T
0.6028570980597530	0.0564812610117153	0.8981239174915968	T	T	T
0.0636613301680430	0.6005794557739667	0.7874120731453950	T	T	T
0.0663557152427158	0.8465455626197900	0.9137856404680076	T	T	T
0.5867175014935000	0.8214922488108858	0.7744215973254660	T	T	T
0.8219725601916323	0.5776164997762326	0.8974604212730596	T	T	T
0.8368901308439722	0.0982864550596523	0.7902187077862923	T	T	T
0.9941402213826821	0.4774857079816507	0.8255234728677312	T	T	T
0.6857043092599775	0.1750248326916394	0.8628569281694252	T	T	T
0.3288715650247647	0.5918056984528167	0.9033122623763113	T	T	T
0.3318725970291294	0.0621568329446570	0.7878318043890500	T	T	T
0.0604302204901097	0.0784068227310600	0.9140670097315239	T	T	T
0.5896911547996447	0.5885047083805062	0.7759676445903840	T	T	T
0.6035412665665852	0.8190324438477763	0.8965951324862134	T	T	T
0.0597148186877519	0.8358227942201937	0.7895371376575392	T	T	T
0.5269020192927146	0.9901258856467161	0.8236732791068930	T	T	T
0.1390902018304135	0.6790218221598145	0.8628540205957340	T	T	T
0.0626629354265220	0.3374499501279572	0.8991959250744934	T	T	T
0.6071075636365808	0.3278214937444415	0.7879829207951187	T	T	T

0.8641570311036292	0.0355233278751725	0.9151828465077287	T	T	T
0.8233897026113722	0.5887851882499355	0.7753313739005592	T	T	T
0.5886198550425765	0.6029883584233110	0.9012788916575887	T	T	T
0.0990526716952925	0.0611797200919240	0.7899614865969263	T	T	T
0.7302652683592543	0.2306493092599204	0.9374205752753584	T	T	T
0.0378867021582451	0.6080235476545574	0.9216466406781222	T	T	T
0.2811194950576995	0.1188606091601542	0.9218581766749614	T	T	T
0.5490492636290287	0.2285819113374311	0.9377013131144626	T	T	T
0.8255490579135892	0.1021922510384144	0.9293034303880621	T	T	T
0.7447605559076260	0.2727509323365957	0.9539718136993138	T	T	T
0.0352213498498600	0.6060693053217282	0.9474198992652726	T	T	T
0.2598083306497693	0.1379988061380238	0.9464409252381962	T	T	T
0.6142747145006571	0.2359063464961385	0.9399829515987759	T	T	T
0.5764752276055211	0.1517272308499062	0.9384902078116636	T	T	T
0.0638914081177059	0.8559753280164387	0.9394500179211495	T	T	T
0.0464007789510346	0.0846022513823094	0.9395251420742717	T	T	T
0.3285928893433220	0.8270935743024204	0.9301607456831630	T	T	T

Best + 4

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 37.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 1

Selective dynamics

Direct

0.7601355639032334 0.0113491388480114 0.6389314665380326 F F F

0.2398011528578508 0.9865686263342539 0.6496441292015049 F F F

0.7715609358761526 0.2384774583519729 0.6496441292015049 F F F

0.0114274436599118 0.2273539761562873 0.6389314665380326 F F F

0.9885092730793446 0.7705637720692522 0.6496441292015049 F F F

0.9992924867227941 0.4989588874152986 0.6442878065983919 F F F

0.5006104591753910 0.9976863097953554 0.6442878065983919 F F F

0.5711050139140639 0.3215061998213713 0.7302137251482463 F F F

0.0957725477933451 0.3440739638851937 0.7190771920085552 F F F

0.5954026351313857 0.8431342143429106 0.7184445361110789 F F F

0.0723481839551638 0.8196467319278042 0.7300196610483383 F F F

0.1070672751660240 0.5702693439724342 0.7302137251482463 F F F

0.5592186766464877 0.0954719189441917 0.7190771920085552 F F F

0.5598634887194152 0.5938629574054701 0.7184445361110789 F F F

0.1070866522751501 0.0714678941073643 0.7300196610483383 F F F

0.3217673805293373	0.1064662464661481	0.7302137251482463	F	F	F
0.3449483355957312	0.5586839063775031	0.7190771920085552	F	F	F
0.8446059148989562	0.5586868263331084	0.7184445361110789	F	F	F
0.8205048314696768	0.1071269550956586	0.7300196610483383	F	F	F
0.3340699873820370	0.8315250108956107	0.7242646141760360	F	F	F
0.8324703755049825	0.3328596096534895	0.7242646141760360	F	F	F
0.3333132055655028	0.3327453316617905	0.7248359247731742	F	F	F
0.8333317331272525	0.8313056494183115	0.7242646141760360	F	F	F
0.2283757639079198	0.7594403068302924	0.6389314665380326	F	F	F
0.4999683632135756	0.4989588874152986	0.6442878065983919	F	F	F
0.7722030242013673	0.7372048960276700	0.6496441328851290	F	F	F
0.4891851419039881	0.7705637644234216	0.6496441328851290	F	F	F
0.7384831957080280	0.4878411963083735	0.6496441328851290	F	F	F
0.7621803931864536	0.0001144406122108	0.8790290626179775	T	T	T
0.9090002266315704	0.6487817047835416	0.8056920198878775	T	T	T
0.4238237155832859	0.6823536264414241	0.8000338105281829	T	T	T
0.9255240863729194	0.1777410097730743	0.7982500288261152	T	T	T
0.4030082970602070	0.1550803035210873	0.8112299250349079	T	T	T
0.2375365772718051	0.7471412201592839	0.8779352178297215	T	T	T
0.4452582325901269	0.9036536663976422	0.8047201313806560	T	T	T
0.8969697503105518	0.4244432959428327	0.7980111178377340	T	T	T
0.7590522181221419	0.2599027868915630	0.8835750496571144	T	T	T
0.8938499285913084	0.9264187543292824	0.7981058826931213	T	T	T
0.4408525478462112	0.4007308898057516	0.8100252144961329	T	T	T
0.2263574011936874	0.2477321524944947	0.8805461231126386	T	T	T
0.0024461560085977	0.2366124148550047	0.8793214585299977	T	T	T
0.6495073031391108	0.4434714869739887	0.8081268539470713	T	T	T
0.6788066776877778	0.8941448236765603	0.7978724485721749	T	T	T
0.1749774210096127	0.8923690595140509	0.7987345338234798	T	T	T
0.1581534956309356	0.4334927985841856	0.8103798946795800	T	T	T
0.5164365666335711	0.2244473893639639	0.8778820630034566	T	T	T
0.6681607535983464	0.6670185814517143	0.8019665215226621	T	T	T
0.0086089154941016	0.4972723420694114	0.8849988398722778	T	T	T
0.6685999446945198	0.1634922952766886	0.8042321683007114	T	T	T
0.4785245637282809	0.5347932820691609	0.8807092399974972	T	T	T
0.1629872546856416	0.1661639241179490	0.8037716550023285	T	T	T
0.5101694389120208	0.9947897014173357	0.8863423576438082	T	T	T
0.1654115607847061	0.6646987103227213	0.8034263485247323	T	T	T
0.2041486935827977	0.0074233382655739	0.8942054190884972	T	T	T
0.2643679503319301	0.5064592462707380	0.8766793435209373	T	T	T
0.9911222118248511	0.7561810427082480	0.8893292804171040	T	T	T
0.2277336602504292	0.2607128538629411	0.6389314702216780	F	F	F
0.5107516054408165	0.2273539685104495	0.6389314702216780	F	F	F
0.2614535057798690	0.5100765994651582	0.6389314702216780	F	F	F

0.0000021130779260 0.0002314344439824 0.6442877992311082 F F F  
0.7430104801071867 0.4973894768239221 0.8854993875392834 T T T  
0.7807441213221656 0.7299895850881770 0.8831158432368018 T T T  
0.5072543742110288 0.7582447875404507 0.8895382804169744 T T T  
0.9911366563555187 0.0021965781148522 0.8836051113678793 T T T  
0.8159621184411563 0.8581513196171642 0.6654559099501753 F F F  
0.3952972119514584 0.9366022075870006 0.6276595231455957 F F F  
0.9176889992569386 0.1543852969704318 0.6160765563022039 F F F  
0.1696015544058724 0.4325678957130350 0.6302162978772969 F F F  
0.3245524865666596 0.8141206723693344 0.6654559099501753 F F F  
0.6662187468277452 0.3938441150176502 0.6276595231455957 F F F  
0.9266414898463324 0.9166133831432433 0.6160765563022039 F F F  
0.3969660861330055 0.1690672319202733 0.6302162978772969 F F F  
0.8593569123797522 0.3233549040052850 0.6654559099501753 F F F  
0.9383551867246638 0.6651398428978581 0.6276595231455957 F F F  
0.1555405424342524 0.9245750032457849 0.6160765563022039 F F F  
0.4333710451824828 0.3964989024812127 0.6302162978772969 F F F  
0.1839746083192395 0.1397664555379237 0.6231196809846153 F F F  
0.6046395148089374 0.0613155675680872 0.6609160677891879 F F F  
0.0822477308365634 0.8435324815089373 0.6724990330310092 F F F  
0.8303351723545234 0.5653498794420528 0.6583592930574795 F F F  
0.6753841932572655 0.1837971027857606 0.6231196809846153 F F F  
0.3337179329961870 0.6040736601374377 0.6609160677891879 F F F  
0.0732951833242197 0.0813043953361117 0.6724990330310092 F F F  
0.6029705936909266 0.8288505432348146 0.6583592930574795 F F F  
0.1405798143202901 0.6745628242694224 0.6231196809846153 F F F  
0.0615815399753714 0.3327778853768564 0.6609160677891879 F F F  
0.8443961875860566 0.0733427183786404 0.6724990330310092 F F F  
0.5665656815175595 0.6014188257935018 0.6583592930574795 F F F  
0.5157056528974664 0.4723168025344222 0.7031710746865940 F F F  
0.9382179561018660 0.3938357985626055 0.7407554663269664 F F F  
0.4134789539146055 0.1791020841611726 0.7528988135720383 F F F  
0.1652751896643423 0.8971290675402415 0.7385849480023765 F F F  
0.0115883806741621 0.5147326163742747 0.7031710746865940 F F F  
0.6667554280548842 0.9368543259418871 0.7407554663269664 F F F  
0.4068903253506875 0.4130228565151839 0.7528988135720383 F F F  
0.9354551584237285 0.1641872661653920 0.7385849480023765 F F F  
0.4726453699615192 0.0111632294020509 0.7031710746865940 F F F  
0.3948988741132311 0.6650179164863772 0.7407554663269664 F F F  
0.1795706135457422 0.4061412956967914 0.7528988135720383 F F F  
0.8991418888258949 0.9343893682713826 0.7385849480023765 F F F  
0.1502554041553523 0.1930157623298641 0.7457436406118987 F F F  
0.7266437877272409 0.2720664091381622 0.7077767387407548 F F F  
0.2526127549163633 0.4863993494907461 0.6961638816933373 F F F

0.5025216625734217	0.7656930053037172	0.7101169368244840	F	F	F
0.6558603363579962	0.1500934214450282	0.7457436406118987	F	F	F
0.0011556798742944	0.7256778258794370	0.7077767387407548	F	F	F
0.2602591083369674	0.2519335125370645	0.6961638816933373	F	F	F
0.7300562656035439	0.5011895953132282	0.7101169368244840	F	F	F
0.1938240818969916	0.6551493419751111	0.7457436406118987	F	F	F
0.2721399812473635	0.0004733764911151	0.7077767387407548	F	F	F
0.4870674713351235	0.2598722351273111	0.6961638816933373	F	F	F
0.7672940286364280	0.7287924234005558	0.7101169368244840	F	F	F
0.8217615271817477	0.8385699437104435	0.9003311514030378	T	T	T
0.8506651196450035	0.8043901346123912	0.7824565789511333	T	T	T
0.2654919174772101	0.7297425643513956	0.8185096268953999	T	T	T
0.2738308494495321	0.8878288123267895	0.9372704928014732	T	T	T
0.7480765774628965	0.5149543205108333	0.8319721066989004	T	T	T
0.9106115928242249	0.1511433627224250	0.8564491991321005	T	T	T
0.5003675380517411	0.2273029872070878	0.8184865272195275	T	T	T
0.1800808237417827	0.4237037317968823	0.8727336276266677	T	T	T
0.4005404056151715	0.7093756487397563	0.8757236824515369	T	T	T
0.3434603787917676	0.8499439666570746	0.7836953400415052	T	T	T
0.9951950999284279	0.2690922993857754	0.8207050518590439	T	T	T
0.6494596215933550	0.4212253755931360	0.8679265060071025	T	T	T
0.7427491933677738	0.7455379810443422	0.8299245861456579	T	T	T
0.9306269553545078	0.9184038743087958	0.8567706506968648	T	T	T
0.2699541154301285	0.4934198896272894	0.8178870050515435	T	T	T
0.3953847661175086	0.1733395213824871	0.8722250113764244	T	T	T
0.8431731620813770	0.3454230823622303	0.8986228052350197	T	T	T
0.8031029741360851	0.3458430673843795	0.7832518044734947	T	T	T
0.7304453470552569	0.9958485176517758	0.8208866921446439	T	T	T
0.9354866712479825	0.6608472633616679	0.8616839066229746	T	T	T
0.5202917009861329	0.7521186521013548	0.8333917833510289	T	T	T
0.1485288555101255	0.9195261277515600	0.8597939548451744	T	T	T
0.2321228787683959	0.2643688234705177	0.8197619762574200	T	T	T
0.4400954097796611	0.3946896357244054	0.8702372770730704	T	T	T
0.4770757471826911	0.5283515657108736	0.8223350571499516	T	T	T
0.1738003389635286	0.1364382917167555	0.8606306105792766	T	T	T
0.6058619779145104	0.0600215809302864	0.8982938473752692	T	T	T
0.0648407253626311	0.5999677530029132	0.7871039769320719	T	T	T
0.0754807960633505	0.8413582320499025	0.9125282761626116	T	T	T
0.5895807708428963	0.8199493247985502	0.7745312869709464	T	T	T
0.8310684740630252	0.5719909995437241	0.8969959683527529	T	T	T
0.8360291062838796	0.0985742317035360	0.7896982864865008	T	T	T
0.9951061933577654	0.4769170376636484	0.8250740494223686	T	T	T
0.6846971693292461	0.1768432601530046	0.8625708776033492	T	T	T
0.3234128035367564	0.5916798464221332	0.9043004480054174	T	T	T

0.3328427074548180	0.0608913209352491	0.7881261922007682	T	T	T
0.0444788672801539	0.0884366808848360	0.9116398821829109	T	T	T
0.5891894731448735	0.5907592470544853	0.7766638660971401	T	T	T
0.6284767206563338	0.8023588911205511	0.8963780934342271	T	T	T
0.0616412724524987	0.8352407585487769	0.7898871298353104	T	T	T
0.5238550501380960	0.9859204322127305	0.8269953543754760	T	T	T
0.1387828566816859	0.6761584248946725	0.8615200062267783	T	T	T
0.0641572955056990	0.3346303525557875	0.8990422170113883	T	T	T
0.6056368436338189	0.3310609628350011	0.7883098332664964	T	T	T
0.8622416423434539	0.0326421990205296	0.9164902038454641	T	T	T
0.8223130411724545	0.5887295906959042	0.7753452797089213	T	T	T
0.5975974284354849	0.6012962471990019	0.9038067896932840	T	T	T
0.0988132574734189	0.0611039340279860	0.7903934256311455	T	T	T
0.7271565191277183	0.2328945893375618	0.9370522994607384	T	T	T
0.0373679786669129	0.6079545609486772	0.9214359922750091	T	T	T
0.2710366348609171	0.1131580176466091	0.9255915160726329	T	T	T
0.5463257896702165	0.2362949808070119	0.9376104424847983	T	T	T
0.8234220004638714	0.1002695240813826	0.9300297628875772	T	T	T
0.7465136152220488	0.2705004069322365	0.9539736380443830	T	T	T
0.0407590289641385	0.6031651649064743	0.9471874975202726	T	T	T
0.2541388587952838	0.1330386518596834	0.9504280248237252	T	T	T
0.6126431076408213	0.2422850267756745	0.9398238273909731	T	T	T
0.5729674640891386	0.1600280614056407	0.9398557328977354	T	T	T
0.0821259999947634	0.8460985710476362	0.9381589975314788	T	T	T
0.2423530844837821	0.9243170974590863	0.9594857114191711	T	T	T
0.3922297430996831	0.9377639307825241	0.9174633586863064	T	T	T

---

**Pt- dimer on 4-H<sub>2</sub>O Indium Tin Oxide ( In order of increasing energy as shown in the SI)**

Best:

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 40.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 2

Selective dynamics

Direct

0.7601349935483341 0.0112866708403061 0.5918531410996906 F F F

0.2398005729400836 0.9865051109549157 0.6017764636764795 F F F

0.7715603559583855 0.2384139429726346 0.6017764636764795 F F F

0.0114268733050125	0.2272915081485820	0.5918531410996906	F	F	F
0.9885086931615774	0.7705002566899140	0.6017764636764795	F	F	F
0.9992919115864609	0.4988958957209277	0.5968148104735604	F	F	F
0.5006098840390578	0.9976233181009846	0.5968148104735604	F	F	F
0.5711043620742373	0.3214348071932136	0.6764094578794229	F	F	F
0.0957719058947717	0.3440036600702783	0.6660934968337102	F	F	F
0.5954019937975659	0.8430639723824385	0.6655074568595296	F	F	F
0.0723475322885747	0.8195753582731911	0.6762296929858138	F	F	F
0.1070666233261974	0.5701979513442836	0.6764094578794229	F	F	F
0.5592180347479143	0.0954016151292763	0.6660934968337102	F	F	F
0.5598628473855953	0.5937927154449980	0.6655074568595296	F	F	F
0.1070860006085610	0.0713965204527511	0.6762296929858138	F	F	F
0.3217667286895107	0.1063948538379904	0.6764094578794229	F	F	F
0.3449476936971578	0.5586136025625876	0.6660934968337102	F	F	F
0.8446052735651364	0.5586165843726363	0.6655074568595296	F	F	F
0.8205041798030877	0.1070555814410454	0.6762296929858138	F	F	F
0.3340693408528068	0.8314541999090395	0.6708986946754578	F	F	F
0.8324697289757523	0.3327887986669182	0.6708986946754578	F	F	F
0.3333125585262877	0.3326744648184672	0.6714279094491360	F	F	F
0.8333310865980224	0.8312348384317403	0.6708986946754578	F	F	F
0.2283751935530205	0.7593778388225871	0.5918531410996906	F	F	F
0.4999677880772424	0.4988958957209277	0.5968148104735604	F	F	F
0.7722024442836002	0.7371413806479694	0.6017764670886834	F	F	F
0.4891845619862210	0.7705002490437209	0.6017764670886834	F	F	F
0.7384826157902609	0.4877776809286729	0.6017764670886834	F	F	F
0.7575009127536939	0.0038629644919239	0.8129218950940178	T	T	T
0.9084057795807334	0.6505411053306769	0.7473304351169955	T	T	T
0.4251478834174506	0.6769662373418884	0.7397373878415173	T	T	T
0.9285120184228731	0.1765572884660263	0.7398278341857538	T	T	T
0.4039078479105720	0.1549000956681368	0.7503975244919814	T	T	T
0.2225871567091864	0.7650696237768200	0.8164230472648349	T	T	T
0.4416414850250613	0.9034433127570619	0.7484749883486647	T	T	T
0.8966233573457698	0.4263391200568653	0.7395071833955800	T	T	T
0.7729909724423606	0.2435269979752466	0.8239518333507269	T	T	T
0.8929004839766388	0.9274377092759167	0.7391955847443725	T	T	T
0.4390752037286947	0.4015490042938339	0.7501385642221454	T	T	T
0.2279675578366074	0.2474045816981460	0.8147796136674906	T	T	T
0.0086954928433182	0.2385907125350416	0.8130391198592924	T	T	T
0.6549764948804466	0.4388071399768297	0.7487756009721988	T	T	T
0.6778725007748470	0.8930983545233061	0.7384668846077507	T	T	T
0.1778671144531019	0.8924440501533070	0.7398778177171955	T	T	T
0.1581905481540890	0.4358373680736061	0.7507827408208589	T	T	T
0.5160233703423220	0.2210473018858035	0.8140351791630392	T	T	T
0.6667589500716845	0.6641017156352058	0.7437593128832247	T	T	T



0.0088865460334995	0.5039633076773984	0.8198096861323446	T	T	T
0.6680912139128126	0.1652529587371151	0.7453545166008945	T	T	T
0.5097040925049184	0.4829311029172323	0.8167414106581473	T	T	T
0.1654071349572291	0.1650899333073181	0.7441911332964212	T	T	T
0.5087953942692537	0.9949675731729575	0.8170250832134713	T	T	T
0.1664924222665710	0.6675157039119246	0.7446291501031472	T	T	T
0.2478419828104705	0.9887908728874069	0.8239353904561819	T	T	T
0.2559582001167262	0.5175684428011353	0.8125261928968455	T	T	T
0.9899875426750457	0.7650508145407339	0.8249462391440098	T	T	T
0.2277330898955299	0.2606503858548734	0.5918531445119086	F	F	F
0.5107510350859172	0.2272915005023819	0.5918531445119086	F	F	F
0.2614529354249697	0.5100141314570905	0.5918531445119086	F	F	F
0.0000015379415927	0.0001684427503292	0.5968148036491172	F	F	F
0.7487545908335357	0.4956964088196375	0.8233697855509362	T	T	T
0.7744146477371217	0.7382901503971467	0.8190484058278981	T	T	T
0.4943187892991977	0.7683534055168719	0.8214677492194374	T	T	T
0.0024232528717142	0.9924368640826285	0.8175926217552971	T	T	T
0.8159615244086851	0.8580862583279867	0.6164231865138845	F	F	F
0.3952966516586898	0.9365408416315262	0.5814117472217859	F	F	F
0.9176884493039310	0.1543250634757953	0.5706822470037736	F	F	F
0.1696009918307482	0.4325062797829844	0.5837801313682718	F	F	F
0.3245518925341884	0.8140556110801569	0.6164231865138845	F	F	F
0.6662181865349766	0.3937827490621757	0.5814117472217859	F	F	F
0.9266409398933249	0.9165531496486068	0.5706822470037736	F	F	F
0.3969655235578813	0.1690056159902227	0.5837801313682718	F	F	F
0.8593563183472810	0.3232898427161075	0.6164231865138845	F	F	F
0.9383546264318952	0.6650784769423836	0.5814117472217859	F	F	F
0.1555399924812448	0.9245147697511484	0.5706822470037736	F	F	F
0.4333704826073586	0.3964372865511621	0.5837801313682718	F	F	F
0.1839740520790443	0.1397055334405266	0.5772064138115667	F	F	F
0.6046389248290538	0.0612509501369871	0.6122178531036582	F	F	F
0.0822471305169117	0.8434667316171627	0.6229473518381141	F	F	F
0.8303345846569883	0.5652855119855289	0.6098494689571652	F	F	F
0.6753836370170703	0.1837361806883635	0.5772064138115667	F	F	F
0.3337173430163034	0.6040090427063376	0.6122178531036582	F	F	F
0.0732945830045679	0.0812386454443370	0.6229473518381141	F	F	F
0.6029700059933987	0.8287861757782906	0.6098494689571652	F	F	F
0.1405792580800949	0.6745019021720253	0.5772064138115667	F	F	F
0.0615809499954878	0.3327132679457563	0.6122178531036582	F	F	F
0.8443955872664048	0.0732769684868657	0.6229473518381141	F	F	F
0.5665650938200315	0.6013544583369779	0.6098494689571652	F	F	F
0.5157050251978106	0.4722480538525815	0.6513593884156137	F	F	F
0.9382172948517464	0.3937633752737284	0.6861744529626890	F	F	F
0.4134782818244815	0.1790284736233474	0.6974230431274506	F	F	F

0.1652745303517804	0.8970568564618375	0.6841638647298254	F	F	F
0.0115877529745063	0.5146638676924340	0.6513593884156137	F	F	F
0.6667547668047646	0.9367819026530100	0.6861744529626890	F	F	F
0.4068896532605635	0.4129492459773587	0.6974230431274506	F	F	F
0.9354544991111666	0.1641150550869881	0.6841638647298254	F	F	F
0.4726447422618634	0.0110944807202102	0.6513593884156137	F	F	F
0.3948982128631116	0.6649454931975001	0.6861744529626890	F	F	F
0.1795699414556182	0.4060676851589662	0.6974230431274506	F	F	F
0.8991412295133330	0.9343171571929787	0.6841638647298254	F	F	F
0.1502547384524391	0.1929428513496916	0.6907950840843355	F	F	F
0.7266431559162427	0.2719972101628656	0.6556256937708298	F	F	F
0.2526121334718141	0.4863312858986362	0.6448685057457979	F	F	F
0.5025210286733994	0.7656235775284301	0.6577934592655481	F	F	F
0.6558596706550830	0.1500205104648558	0.6907950840843355	F	F	F
0.0011550480632962	0.7256086269041404	0.6556256937708298	F	F	F
0.2602584868924183	0.2518654489449546	0.6448685057457979	F	F	F
0.7300556317035216	0.5011201675379411	0.6577934592655481	F	F	F
0.1938234161940784	0.6550764309949457	0.6907950840843355	F	F	F
0.2721393494363653	0.0004041775158186	0.6556256937708298	F	F	F
0.4870668498905744	0.2598041715352011	0.6448685057457979	F	F	F
0.7672933947364058	0.7287229956252688	0.6577934592655481	F	F	F
0.8167002687826644	0.8457446611549347	0.8355744716945095	T	T	T
0.8498095848637600	0.8044870043343570	0.7248633774027319	T	T	T
0.2709157319285265	0.7297833973883490	0.7617541705800126	T	T	T
0.4104115437625713	0.9270886962084399	0.8033601405173542	T	T	T
0.7506106370783628	0.5128469994469779	0.7722573060193467	T	T	T
0.9273761237856285	0.1452415873677829	0.7958741472289776	T	T	T
0.4992921108535602	0.2297170007509793	0.7589689354720808	T	T	T
0.1802498446337272	0.4268375673718993	0.8078559006343045	T	T	T
0.3304331313632095	0.8200962482805748	0.8334414307528154	T	T	T
0.3442355986947749	0.8480291641347338	0.7254832282780442	T	T	T
0.9977449823653405	0.2704760246849007	0.7593520830359948	T	T	T
0.6700090658252796	0.3949878012490506	0.8007359915950900	T	T	T
0.7372399847142752	0.7471686416280828	0.7699860245584005	T	T	T
0.9220226984293747	0.9267350283910173	0.7930814958108480	T	T	T
0.2696458888830703	0.4978613614877982	0.7578143260931336	T	T	T
0.3969149741065665	0.1676215526792878	0.8071922462531416	T	T	T
0.8536012933684893	0.3388482848925390	0.8331295069427294	T	T	T
0.8063175771146198	0.3437497734915848	0.7254208708493007	T	T	T
0.7282368814051160	0.9977337489835585	0.7592193248916701	T	T	T
0.9310547161342775	0.6717666546541873	0.7986723832944062	T	T	T
0.5134946103622988	0.7363405052663212	0.7713008584593148	T	T	T
0.1470992831700605	0.9315459888986041	0.7935712026211063	T	T	T
0.2331905115591409	0.2656304285286321	0.7592257508126309	T	T	T

0.4297061102118142	0.3944985080210944	0.8065978140497452	T	T	T
0.4808098224815493	0.5251641663386244	0.7647673138682740	T	T	T
0.1745969529291811	0.1348600266828198	0.7970351953142590	T	T	T
0.6036426548670930	0.0578756830549415	0.8329458848675508	T	T	T
0.0648933844042851	0.6018474426906241	0.7293031888433373	T	T	T
0.0684342288376108	0.8527285569950024	0.8435280781871394	T	T	T
0.5866068896208320	0.8172203040819551	0.7183588657360748	T	T	T
0.8352044144833830	0.5784195507457176	0.8312499334257580	T	T	T
0.8362942990266395	0.1001492978670297	0.7320442512786300	T	T	T
0.9945576758898981	0.4801552803299778	0.7648344636589365	T	T	T
0.6850352387855961	0.1763701179108427	0.7997201983249721	T	T	T
0.2883146588936462	0.6164308414269923	0.8449847011192376	T	T	T
0.3330162783370688	0.0603502430103070	0.7297610583530377	T	T	T
0.0759012922609156	0.0697789325858244	0.8465650278493655	T	T	T
0.5911495118365256	0.5850598156260685	0.7191430326613389	T	T	T
0.6112351886717737	0.8226455206611871	0.8299150047869192	T	T	T
0.0629256585317704	0.8360103699175790	0.7318409804960215	T	T	T
0.5267235757129587	0.9896444817711130	0.7629909196306273	T	T	T
0.1370771889416872	0.6805742234983266	0.7975828569035479	T	T	T
0.0680086253335425	0.3369597626379655	0.8325217634492963	T	T	T
0.6040342714949184	0.3320110207372911	0.7299345424601384	T	T	T
0.8556650390005547	0.0690165063063351	0.8457581984843111	T	T	T
0.8213380797818395	0.5899037444651087	0.7186298310424460	T	T	T
0.5650399788787591	0.4966285371151221	0.8942106250031153	T	T	T
0.0997619454736013	0.0617843836731492	0.7314093499059031	T	T	T
0.6810963564575861	0.2812915634351462	0.8683976983087214	T	T	T
0.0404856221020167	0.6123944956477505	0.8527575717728832	T	T	T
0.2971614913244223	0.0889071248826310	0.8520254556649178	T	T	T
0.5300282273538466	0.2499165514745820	0.8674216479041267	T	T	T
0.8575130144345338	0.0623582382561247	0.8696403067907518	T	T	T
0.6618157536427579	0.3481715694903523	0.8793622066658898	T	T	T
0.0561738590200421	0.6021687088271190	0.8761393342520489	T	T	T
0.2821621308831276	0.0998153871764289	0.8754768873664455	T	T	T
0.5961309440044775	0.2656530317034806	0.8690396042401832	T	T	T
0.5589408690407469	0.1769981392645849	0.8747438962522059	T	T	T
0.0682493139614002	0.0708008360690962	0.8704107399677294	T	T	T
0.5626919795606302	0.5297751846695403	0.9152277158766960	T	T	T
0.4180274021401129	0.5626152335923537	0.8715021602167778	T	T	T
0.5733477610705133	0.5965200245138591	0.8544603950296907	T	T	T

Best + 1

In Sn O H Pt

1.00000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000  
-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O H Pt  
56 8 100 8 2

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7588914308244885	0.0031411894414361	0.6412433899536347	T	T	T
0.9057484205485483	0.6494149160474433	0.5879295950795057	T	T	T
0.4258935142330636	0.6735523830114121	0.5828748485291758	T	T	T
0.9277418500054937	0.1769668489050760	0.5817893751830521	T	T	T
0.4043985412478752	0.1563513868465210	0.5910588832376286	T	T	T
0.2277236274459792	0.7625582903475486	0.6404015385136180	T	T	T
0.4397827214887895	0.9040971342735000	0.5896829273118992	T	T	T
0.8938151813426316	0.4265756881353597	0.5820136701020507	T	T	T
0.7744530031412423	0.2469954334368279	0.6453985254928173	T	T	T

0.8926083353245260	0.9263677255622274	0.5819853353151460	T	T	T
0.4363516262242160	0.4045172487764453	0.5907086733914688	T	T	T
0.2282718439286612	0.2496002014410106	0.6416244148274323	T	T	T
0.0109488895290121	0.2388865617284431	0.6388589130933294	T	T	T
0.6493410802830897	0.4413317589544397	0.5904712485313912	T	T	T
0.6773586203080965	0.8935349578064021	0.5815188576178817	T	T	T
0.1767888760746885	0.8931607194937398	0.5821871691857212	T	T	T
0.1569274310539237	0.4361228297930498	0.5909030013765625	T	T	T
0.5179039500873819	0.2240312419363571	0.6417944697357646	T	T	T
0.6632912850231860	0.6659351283407484	0.5858005048450072	T	T	T
0.0072690733928843	0.5016138412109695	0.6449025303278840	T	T	T
0.6678765655969354	0.1640439730586484	0.5866601913678332	T	T	T
0.5103169554245189	0.4555753231083027	0.6496852898439298	T	T	T
0.1663946780134722	0.1651685453781495	0.5855293812535231	T	T	T
0.5098327115154272	0.9971705891362521	0.6430170338181368	T	T	T
0.1634361195956641	0.6681746914715165	0.5856420734565206	T	T	T
0.2421442630455077	0.9981673370710998	0.6504414031311089	T	T	T
0.2484489233586940	0.5235072315558275	0.6397897855146202	T	T	T
0.9844056138560922	0.7610112434960618	0.6477010062212365	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7512352499380344	0.4902148165002504	0.6481127686382092	T	T	T
0.7686036814038167	0.7374516078072498	0.6449144301777350	T	T	T
0.4840789600145766	0.7754883880354436	0.6478444104770804	T	T	T
0.9954990892121680	0.9966297922491287	0.6431972550939694	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F

0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8148009950960006	0.8425128113453677	0.6574329154148421	T	T	T
0.8491185046248960	0.8039635357433590	0.5707139439748672	T	T	T
0.2690404261116307	0.7308648419838416	0.5987166422909674	T	T	T
0.4041780877813285	0.9328296634523946	0.6332808255974548	T	T	T
0.7477774042149585	0.5138499205863679	0.6082436331431829	T	T	T
0.9266359490858540	0.1454668023181026	0.6255071275709211	T	T	T
0.5005409020392009	0.2299361232855533	0.5980788176273784	T	T	T
0.1772032083329493	0.4280527866548977	0.6354630904443529	T	T	T
0.3168626610417687	0.8353796223338715	0.6596568303592345	T	T	T
0.3440842998359739	0.8469325185195198	0.5713427112026537	T	T	T
0.9980798453504498	0.2697396157446759	0.5969093699548500	T	T	T
0.6650768834538864	0.4058925225190350	0.6334265962332595	T	T	T
0.7351380709728623	0.7472103488153053	0.6061268014685953	T	T	T

0.9277485068096635	0.9179058486077737	0.6247234459857626	T	T	T
0.2644609842089548	0.5013079464514004	0.5962791239208783	T	T	T
0.3971612237650703	0.1689009485179158	0.6359957637860175	T	T	T
0.8577384431581102	0.3372080661021105	0.6535382409819699	T	T	T
0.8029614240328677	0.3452286659800810	0.5715810924168296	T	T	T
0.7301192910392315	0.9957075925496701	0.5985145285611024	T	T	T
0.9276242985562632	0.6663795438140544	0.6286476217095389	T	T	T
0.5100643784807352	0.7385528232007020	0.6083631119247401	T	T	T
0.1405248022236658	0.9293499611412606	0.6252574318850238	T	T	T
0.2334725668867681	0.2657511641888889	0.5977718694084672	T	T	T
0.4142093017648171	0.3961307300615988	0.6335828229288395	T	T	T
0.4811047829695140	0.5217968663236953	0.6021351912373007	T	T	T
0.1742239508846054	0.1354271174582582	0.6269747628000836	T	T	T
0.6024270894243967	0.0628067992947003	0.6557946989293890	T	T	T
0.0616095106687170	0.6022022805041858	0.5737667670676622	T	T	T
0.0709115395465187	0.8479030671712984	0.6654203097941124	T	T	T
0.5847427932862330	0.8190976930675652	0.5657617783329610	T	T	T
0.8320390954184226	0.5761652668409980	0.6549117484896405	T	T	T
0.8369357852133008	0.0985832801644248	0.5762413361749783	T	T	T
0.9931695477826251	0.4783701770335345	0.6016752074648972	T	T	T
0.6901250472975211	0.1749658224518248	0.6288228632355738	T	T	T
0.2802807185850444	0.6219392835959570	0.6657086297274334	T	T	T
0.3333591812156359	0.0607652753981949	0.5745899378512284	T	T	T
0.0678391878251579	0.0730026141904441	0.6663125250606831	T	T	T
0.5903988557294644	0.5861237831949544	0.5662966949704418	T	T	T
0.6060565759822667	0.8266760857428287	0.6530088954686846	T	T	T
0.0619630626015763	0.8366571486783296	0.5758369605564789	T	T	T
0.5259007230178075	0.9901905011066405	0.6007208705470456	T	T	T
0.1313810022161928	0.6877190151572752	0.6270560575440330	T	T	T
0.0676920658380516	0.3364543626511549	0.6554522813638702	T	T	T
0.6048382208517079	0.3306168870526906	0.5747519975238431	T	T	T
0.8658491119137796	0.0363259179302803	0.6673216845286922	T	T	T
0.8175937880905259	0.5902996842266484	0.5656899700562875	T	T	T
0.7247723744719347	0.4878707500244566	0.6939039580442030	T	T	T
0.0998984284805281	0.0616803018814388	0.5758434164432334	T	T	T
0.7597974029667705	0.2243280093484516	0.6856028602261017	T	T	T
0.0511236759590452	0.6090998805332977	0.6699757060030446	T	T	T
0.2813461062867716	0.1061075709931156	0.6718319867082311	T	T	T
0.5494008834234660	0.3114745264903810	0.6720281332003083	T	T	T
0.8342859873899202	0.1001967554804444	0.6791318302774229	T	T	T
0.7756062394265595	0.2716555820732737	0.6953962424934462	T	T	T
0.0629015120818768	0.6033365635565752	0.6885861421686641	T	T	T
0.2619042458884254	0.1223001577639344	0.6899594170997135	T	T	T
0.6187544729906549	0.2749813751055203	0.6808960298512499	T	T	T

0.0776643454895523	0.8516314430850270	0.6841119645789127	T	T	T
0.0533358345458009	0.0829917125495301	0.6848472180063240	T	T	T
0.7643095568010936	0.5158872771932395	0.7028399766360732	T	T	T
0.4125755928057361	0.6366960999206956	0.6676672255408107	T	T	T
0.5951405451355318	0.6156150497645985	0.6764854883791585	T	T	T

Best + 2

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 2

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F



0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7602085168887849	0.0090143370656588	0.6416584080952373	T	T	T
0.9085780324336873	0.6518856702093379	0.5901152095408692	T	T	T
0.4255864807714074	0.6795013726081421	0.5844552544508038	T	T	T
0.9275653617342718	0.1780540304821066	0.5816794273228829	T	T	T
0.4035069929176193	0.1544162460851108	0.5908846330038510	T	T	T
0.2345587023868045	0.7620864975153326	0.6404774977993404	T	T	T
0.4413926167048830	0.9037281614755832	0.5896748968682508	T	T	T
0.8955759275550855	0.4262054723685600	0.5812671201117773	T	T	T
0.7660918160667841	0.2429590259323064	0.6491283527102116	T	T	T
0.8923531588142217	0.9279258800627799	0.5819855132212197	T	T	T
0.4406766549310002	0.4019885102585067	0.5907038044370936	T	T	T
0.2269943004328329	0.2462309445029155	0.6416221001186440	T	T	T
0.0047120541752946	0.2362679604318769	0.6393257748779994	T	T	T
0.6533498840069539	0.4393548916140160	0.5885048189003500	T	T	T
0.6795653734909777	0.8934562381925817	0.5819481061751764	T	T	T
0.1749645143253913	0.8944353700270063	0.5823301104849735	T	T	T
0.1583181865329423	0.4346546711292720	0.5908712816572537	T	T	T
0.5126551113933583	0.2236311857470083	0.6402566219680161	T	T	T
0.6695488815722732	0.6657830133852423	0.5847256182593680	T	T	T
0.9997995425830034	0.4882233793625453	0.6428542096294813	T	T	T
0.6672797417227319	0.1644142563554835	0.5866629279233053	T	T	T
0.5018508468914190	0.5145891425929462	0.6425757074167302	T	T	T
0.1660882061896199	0.1638815493101421	0.5860787427889123	T	T	T
0.5089042730662476	0.9898636002912753	0.6431206374649137	T	T	T
0.1645121619744479	0.6682149768973005	0.5860125989944118	T	T	T
0.2452752519333818	0.9996634726343877	0.6529160681086672	T	T	T
0.2592914805241407	0.5083410234234851	0.6393950598793477	T	T	T
0.9901644012476103	0.7672204681312518	0.6483324103465496	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7459246678932927	0.4869164337862107	0.6451962025381746	T	T	T
0.7707855401051286	0.7355877687196153	0.6471314085106253	T	T	T
0.4912860510589094	0.7583871527202518	0.6464517380899061	T	T	T
0.9900065520961907	0.0063227748204080	0.6425577592000484	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F

0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8200231944882056	0.8454109127949634	0.6565576938269149	T	T	T
0.8505285311530915	0.8041294847460385	0.5710531756146457	T	T	T
0.2635973124020049	0.7336352564340762	0.5964711675832067	T	T	T

0.4009484010236293	0.9279609226846265	0.6322908542042039	T	T	T
0.7518902273476858	0.5112700093496733	0.6062029673821173	T	T	T
0.9224765937884143	0.1527193870032899	0.6236010983476740	T	T	T
0.4957771581278798	0.2322242701651905	0.5970751834845467	T	T	T
0.1732461094549399	0.4261774150399669	0.6362189851319763	T	T	T
0.4056620843345486	0.6819723991895266	0.6338896794602168	T	T	T
0.3443008779964776	0.8489200737113288	0.5713471099888972	T	T	T
0.9987727323351535	0.2720323127943108	0.5972411349042893	T	T	T
0.6657886546306858	0.4033921309551481	0.6308928965078130	T	T	T
0.7446105606273442	0.7447593238967768	0.6073259842135545	T	T	T
0.9296611556069191	0.9196387363237999	0.6240270066091096	T	T	T
0.2687440062584902	0.4958619676140419	0.5969638636133352	T	T	T
0.3967406092899976	0.1662394429001074	0.6350970232153865	T	T	T
0.8494017552337674	0.3353478037963988	0.6568805467321633	T	T	T
0.8059995069871128	0.3434691722571104	0.5707089741012074	T	T	T
0.7300194499521012	0.9980657425565841	0.5986128586531434	T	T	T
0.9411919569462607	0.6556982431345306	0.6336298983182698	T	T	T
0.5233769544560553	0.7396770866385137	0.6067580618455188	T	T	T
0.1412629566932126	0.9301193088556871	0.6257576324502128	T	T	T
0.2322158569150015	0.2655912055469165	0.5977724684285105	T	T	T
0.4350567700512400	0.4016428465519344	0.6352657635924928	T	T	T
0.4842423551010338	0.5207735398419154	0.5991946970902786	T	T	T
0.1737033095391024	0.1335157561658513	0.6275969499301181	T	T	T
0.6019415884682372	0.0576745563742251	0.6548314277467790	T	T	T
0.0640182901387680	0.6015839928508533	0.5747472418769710	T	T	T
0.0578867649117699	0.8669705791370282	0.6658345668234140	T	T	T
0.5884716520486194	0.8204463500257969	0.5655062160327826	T	T	T
0.8276815938161363	0.5674876086454936	0.6542621353044377	T	T	T
0.8358406920775548	0.0999281405005229	0.5759931997447201	T	T	T
0.9937936368470925	0.4784988651695181	0.6007634037875549	T	T	T
0.6756292597610222	0.1839911338393681	0.6288184022640599	T	T	T
0.4209779570375971	0.5478946821811750	0.6808615930043516	T	T	T
0.3330595088391280	0.0610268593750865	0.5744575459684699	T	T	T
0.0599014438772255	0.0862256569446057	0.6655918584054358	T	T	T
0.5917785713175255	0.5874778588847738	0.5658614623476923	T	T	T
0.6017528614914450	0.8157882068628668	0.6541313144465082	T	T	T
0.0604614828828873	0.8368873362634949	0.5756319351914677	T	T	T
0.5269873523370370	0.9889206257139326	0.6008996175538658	T	T	T
0.1408034181473518	0.6844711316998585	0.6283189746198089	T	T	T
0.0653518795769958	0.3299626231439155	0.6559518020030367	T	T	T
0.6066833782767572	0.3287504258100493	0.5741864827765805	T	T	T
0.8500709786468165	0.0759920088988436	0.6627458469812245	T	T	T
0.8239075337227384	0.5912007329242899	0.5656151318763821	T	T	T
0.5981810191831345	0.5957001232052977	0.6564399825947577	T	T	T

0.0992365102422195	0.0622995742033182	0.5757429678577924	T	T	T
0.6518596180674532	0.3124095042886065	0.6809327250626133	T	T	T
0.1001840439983929	0.6633248146667939	0.6807910221926388	T	T	T
0.2841175965451851	0.1145806783766620	0.6720632898297996	T	T	T
0.5228964949341893	0.2494268060961219	0.6829698648368693	T	T	T
0.6850960286638649	0.3131683064422723	0.6971459087802097	T	T	T
0.0761844173459369	0.6681417668915367	0.6985531703134085	T	T	T
0.2624314331287919	0.1330690767073297	0.6899878974938923	T	T	T
0.5815738135191598	0.2735764548952730	0.6837829855202994	T	T	T
0.5586541176941832	0.1743941440276006	0.6874330722952593	T	T	T
0.0617329382647092	0.8700278611786503	0.6845885576832829	T	T	T
0.0384210534885501	0.0985184294002493	0.6837055664771737	T	T	T
0.4496090534121771	0.4798731742957357	0.6896023228454856	T	T	T
0.2611114134867804	0.6108021226386628	0.6799339541173263	T	T	T
0.3240847683757765	0.8245335306388059	0.6780716040771000	T	T	T

Best + 3

1.0000000000000000

14.6581653332033461	0.0000000000000000	0.0000000000000000
7.3189795989957736	12.7095316657975506	0.0000000000000000
-0.0098891034462902	-0.0168642175486257	51.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 2

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F

0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7599798150355485	0.0028421790321136	0.6413245250564061	T	T	T
0.9078005770518152	0.6505974020664180	0.5883942174594324	T	T	T
0.4255641122296089	0.6821501558857906	0.5841509651901041	T	T	T
0.9271518495229039	0.1769126650198207	0.5822385114825671	T	T	T
0.4023558474016804	0.1565084195929491	0.5910167839374942	T	T	T
0.2385123024742411	0.7594490994374927	0.6377338616549634	T	T	T
0.4406031168381033	0.9065538779032761	0.5897481426989766	T	T	T
0.8987205318757037	0.4233896387957604	0.5820519668891675	T	T	T
0.7641415452159552	0.2557874142288673	0.6447713639157536	T	T	T
0.8937213149129962	0.9270031325689984	0.5823945063090713	T	T	T
0.4404078782559430	0.4026823927749439	0.5908078333577007	T	T	T
0.2247033183362335	0.2467487426258590	0.6418531281394912	T	T	T
0.0094869423206928	0.2296005874884110	0.6416136598599562	T	T	T
0.6520185850564119	0.4416481518303884	0.5885315342075863	T	T	T
0.6778314216703981	0.8951683654212182	0.5816364789741820	T	T	T
0.1754568732847614	0.8928203832051460	0.5818086420874143	T	T	T
0.1571605349853541	0.4336470706927830	0.5911828882264193	T	T	T
0.5147804611039106	0.2248607536684346	0.6404732339366747	T	T	T
0.6695427308966690	0.6672838975368249	0.5835015213110754	T	T	T
0.0057151140226284	0.4999010670643700	0.6456834568913633	T	T	T
0.6680130866529701	0.1640986334658560	0.5866743800530779	T	T	T
0.4903458149343676	0.5332103899547325	0.6419663221203989	T	T	T
0.1646495493364643	0.1645505915913353	0.5862008732467283	T	T	T
0.5040354801371877	0.9959812699121184	0.6437094514844783	T	T	T
0.1646188307568073	0.6641848404341627	0.5860954169742912	T	T	T
0.2352521737871153	0.9981975957274792	0.6526549236617065	T	T	T
0.2621303792734859	0.5046889266821472	0.6400812615950195	T	T	T
0.9905455927039543	0.7574676056897556	0.6485934887981188	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7457719967113421	0.4951729483275409	0.6446958024622791	T	T	T
0.7702079915546340	0.7377433374607908	0.6447192687462332	T	T	T

0.4951910892983978	0.7642475166929601	0.6456413349769394	T	T	T
0.9993918506186459	0.0000763453325807	0.6446673830911925	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F

0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8174125864293419	0.8424198471325998	0.6565743298022542	T	T	T
0.8503379758007129	0.8047891739110914	0.5707267017114059	T	T	T
0.2623431152054347	0.7296206034822480	0.5949319372701984	T	T	T
0.3980656802366286	0.9306055885167034	0.6336089891944443	T	T	T
0.7506202919039622	0.5136851309776183	0.6057022325073000	T	T	T
0.9157459489409689	0.1488105431280295	0.6251858087427128	T	T	T
0.4976597990483769	0.2320492120252751	0.5975090789146681	T	T	T
0.1773599460705670	0.4234956238587261	0.6361221931142089	T	T	T
0.4058196744194539	0.7013599603855386	0.6286455359311889	T	T	T
0.3440340454277734	0.8498188278543827	0.5714928235038330	T	T	T
0.9970141828050375	0.2680393568606791	0.5985047375447521	T	T	T
0.6570951901979964	0.4150610161568908	0.6318230636495485	T	T	T
0.7400590225817832	0.7481532862000866	0.6057919626516102	T	T	T
0.9327198207747399	0.9187727221137757	0.6251424961531173	T	T	T
0.2697289588261090	0.4936532909490898	0.5970114871901869	T	T	T
0.3947570067001421	0.1708334099794582	0.6358995560700190	T	T	T
0.8480141910653101	0.3424856467553122	0.6549474055115957	T	T	T
0.8055790380685348	0.3435754077890745	0.5710230754955183	T	T	T
0.7307580291454294	0.9971901010549141	0.5987317849271742	T	T	T
0.9320379117502812	0.6646140742546431	0.6290009767392911	T	T	T
0.5296869853845337	0.7465890329269746	0.6063262612819985	T	T	T
0.1499117140993604	0.9231798742534402	0.6253546242274314	T	T	T
0.2324144876796511	0.2650358068522436	0.5976264190347416	T	T	T
0.4358468073685060	0.4019349767687931	0.6360172184950367	T	T	T
0.4815164262122964	0.5233176237040141	0.5991663820720623	T	T	T
0.1759511632786439	0.1337475230691796	0.6273260824165141	T	T	T
0.6006317161075490	0.0606511672344962	0.6554529170122141	T	T	T
0.0646585361994066	0.6000010415341820	0.5744479861548115	T	T	T
0.0683708331375701	0.8484815734207337	0.6656289027923368	T	T	T
0.5862889857357730	0.8235288011940608	0.5649972429549746	T	T	T
0.8258447870826118	0.5771348512150536	0.6537879989212410	T	T	T
0.8359326673196152	0.0993205397666382	0.5760658808767419	T	T	T
0.9939064306933220	0.4785047190263024	0.6020047283956768	T	T	T
0.6823488018554249	0.1791333280971157	0.6294388101149421	T	T	T
0.2930061543220220	0.5239391313530835	0.6816014517889621	T	T	T
0.3324986661319855	0.0620416430224304	0.5745169861155633	T	T	T
0.0650776086626550	0.0763674496971285	0.6642853211205584	T	T	T
0.5903283532005859	0.5888903040072706	0.5658574778281121	T	T	T

0.6058149944140596	0.8201013431273820	0.6537675691600828	T	T	T
0.0604579978374045	0.8347837142017573	0.5759639184238421	T	T	T
0.5257111934818809	0.9918372623705621	0.6015246941871483	T	T	T
0.1495647664937048	0.6725281462242442	0.6303582238591614	T	T	T
0.0632284307617225	0.3352272110014785	0.6555801239336158	T	T	T
0.6064313029113579	0.3295229846999249	0.5746215122988310	T	T	T
0.8618485561598230	0.0394090457502870	0.6671556130204715	T	T	T
0.8244967272172081	0.5890071405958068	0.5653021447325137	T	T	T
0.5969083261513388	0.6025184963637119	0.6560307397534636	T	T	T
0.0987845522982023	0.0614236839723166	0.5759014853812042	T	T	T
0.7228212869384825	0.2377776556614771	0.6837150174346258	T	T	T
0.0313045757249918	0.6124396287129732	0.6721876622921413	T	T	T
0.2831511996749552	0.1060154242982171	0.6722491371018245	T	T	T
0.5398671704562337	0.2485469773337906	0.6836686943170139	T	T	T
0.8255391667623929	0.1015709794102067	0.6787598487650300	T	T	T
0.7383629335810038	0.2788611172209927	0.6958917383769976	T	T	T
0.0797313477886512	0.5883780420749671	0.6868181109548034	T	T	T
0.2587868837942195	0.1254282176676543	0.6900141813971233	T	T	T
0.6096628998521834	0.2500513805055074	0.6849149887472704	T	T	T
0.5608253460275033	0.1754564060598788	0.6881062737872223	T	T	T
0.0758487168531032	0.8534359043518132	0.6842620283215030	T	T	T
0.3567973859454338	0.4578246006271786	0.6859752723593434	T	T	T
0.3352577378173133	0.6405531432365552	0.6778285221956640	T	T	T
0.3482515096054610	0.8107104815279939	0.6811743940843026	T	T	T

**Pt-trimer on 4-H<sub>2</sub>O Indium Tin Oxide ( In order of increasing energy as shown in the SI)**

Best:

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.1539898045825509 0.0117348602194267 44.4205337057521348

In Sn O H Pt

56 8 100 8 3

Selective dynamics

Direct

0.7601299999999966 0.0111199999999982 0.3212997282865118 F F F

0.2434165335433676 0.9854015590178022 0.3303952552037757 F F F

0.7751763166389409 0.2373103908289238 0.3303952552037757 F F F

0.7758184051208019 0.7360378284433793 0.3303952583554732 F F F

0.0149432086993002 0.2262095211845576 0.3212997282865118 F F F



0.9921246538137325	0.7693967045361916	0.3303952552037757	F	F	F
0.4928005224042380	0.7693966968225325	0.3303952583554732	F	F	F
0.0028580599244989	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.5041760321789965	0.9965305487398979	0.3258474991741451	F	F	F
0.5754695993874179	0.3201690636836290	0.3988024242875312	F	F	F
0.1000335765341589	0.3427603350605963	0.3893470124551968	F	F	F
0.5996577811357540	0.8418219209004363	0.3888098595214231	F	F	F
0.0767109653050468	0.8183100051456691	0.3986376552181525	F	F	F
0.1114318610020959	0.5689322078448171	0.3988024242875312	F	F	F
0.5634797054024645	0.0941582901478952	0.3893470124551968	F	F	F
0.5641186345741858	0.5925506639960076	0.3888098595214231	F	F	F
0.1114494334935046	0.0701311676366885	0.3986376552181525	F	F	F
0.3261319662881945	0.1051291103740297	0.3988024242875312	F	F	F
0.3492093643680292	0.5573702775606932	0.3893470124551968	F	F	F
0.8488610604088223	0.5573745329822160	0.3888098595214231	F	F	F
0.8248676130051109	0.1057902286404513	0.3986376552181525	F	F	F
0.3383792532104977	0.8302004322606820	0.3937513645347082	F	F	F
0.8367796411124147	0.3315350310755605	0.3937513645347082	F	F	F
0.7420985760889067	0.4866741287148670	0.3303952583554732	F	F	F
0.3376277839809418	0.3314195471817456	0.3942364325472383	F	F	F
0.8376409987888778	0.8299810709125808	0.3937513645347082	F	F	F
0.2318915289287986	0.7582958518869418	0.3212997282865118	F	F	F
0.5035339362280098	0.4978031261506217	0.3258474991741451	F	F	F
0.7685842099745938	0.0101077595072514	0.5257313752849756	T	T	T
0.9120712059987645	0.6501615606863415	0.4661329946318516	T	T	T
0.4325327148542324	0.6763995607846123	0.4558503439532309	T	T	T
0.9326135453282934	0.1770018302427042	0.4559568171945558	T	T	T
0.4082150272211669	0.1545978723371444	0.4664085689235317	T	T	T
0.2389873698817299	0.7570322940489660	0.5236348658011734	T	T	T
0.4473374876100272	0.9037400546480826	0.4652133576456377	T	T	T
0.8977449102889499	0.4267284014435801	0.4568529207063917	T	T	T
0.7777617932184089	0.2356219838572350	0.5351106870072283	T	T	T
0.8991803796652202	0.9258309630662647	0.4563782383148795	T	T	T
0.4426121736357334	0.3990790938633709	0.4660046787273608	T	T	T
0.2350068871923237	0.2391853859762767	0.5254552417630034	T	T	T
0.0106055566593352	0.2353516833029860	0.5223755940021165	T	T	T
0.6556963231400095	0.4381854811453715	0.4654438529930889	T	T	T
0.6846074426032465	0.8928192498087881	0.4567011955843973	T	T	T
0.1822918647596234	0.8924275446019516	0.4564865025809209	T	T	T
0.1630209489759863	0.4347433097392900	0.4669925430901352	T	T	T
0.5219486436602685	0.2224695362890964	0.5242406634583724	T	T	T
0.6716934844948457	0.6647529280419509	0.4630611859543135	T	T	T
0.0196259512301800	0.4856500132772475	0.5295406085955953	T	T	T
0.6734023085217483	0.1629064515917854	0.4616559747157770	T	T	T

0.4901934373278341	0.5002962653722336	0.5255470806409857	T	T	T
0.1703112868360218	0.1641650130895985	0.4604124979896302	T	T	T
0.5105414780554838	0.0013468478411456	0.5279669156195080	T	T	T
0.1716323312209048	0.6656824716386569	0.4605652128019825	T	T	T
0.2527162937370681	0.9878114953190519	0.5333653438655711	T	T	T
0.2579446216749902	0.5196185059307997	0.5239205200659665	T	T	T
0.9989793806207622	0.7662687379185061	0.5332521927728306	T	T	T
0.2649692708826521	0.5089321445234489	0.3212997314382093	F	F	F
0.0035676858993980	0.9990756731962591	0.3258474928707500	F	F	F
0.2312494253227371	0.2595683989238466	0.3212997314382093	F	F	F
0.5142673705564675	0.2262095135495770	0.3212997314382093	F	F	F
0.7257843618004723	0.4831446626693751	0.5339407357422409	T	T	T
0.7861656441477930	0.7460852692217753	0.5341503025968677	T	T	T
0.4879508316310053	0.7621390001243031	0.5322060620915458	T	T	T
0.0009333761022398	0.0019535683483246	0.5269519756843716	T	T	T
0.8197245306682390	0.8569508763088862	0.3438201600901110	F	F	F
0.3987081608861587	0.9354815458449366	0.3117293471016254	F	F	F
0.9209922397635992	0.1532890848265680	0.3018948934479724	F	F	F
0.1730362783713417	0.4314418369345745	0.3139001625321427	F	F	F
0.3283148989230753	0.8129202287039874	0.3438201600901110	F	F	F
0.6696296955644030	0.3927234531479655	0.3117293471016254	F	F	F
0.9299447303656834	0.9155171710171928	0.3018948934479724	F	F	F
0.4004008100581657	0.1679411731758620	0.3139001625321427	F	F	F
0.8631193247769602	0.3221544605376110	0.3438201600901110	F	F	F
0.9417661356484075	0.6640191810841145	0.3117293471016254	F	F	F
0.1588437830399343	0.9234787908990896	0.3018948934479724	F	F	F
0.4368057691204541	0.3953728437525825	0.3139001625321427	F	F	F
0.1873433418511681	0.1386553765605854	0.3078748193479939	F	F	F
0.6083597115729162	0.0601247068673771	0.3399656321113582	F	F	F
0.0860756361414658	0.8423171707979833	0.3498000846394120	F	F	F
0.8340315940587928	0.5641644156990608	0.3377948166808480	F	F	F
0.6787529268564683	0.1826860237720780	0.3078748193479939	F	F	F
0.3374381297247666	0.6028827994856698	0.3399656321113582	F	F	F
0.0771230884463421	0.0800890850007647	0.3498000846394120	F	F	F
0.6066670156113929	0.8276650793790878	0.3377948166808480	F	F	F
0.1439485478357412	0.6734517452805591	0.3078748193479939	F	F	F
0.0653017366889372	0.3315870247342687	0.3399656321113582	F	F	F
0.8482240925665394	0.0721274080750689	0.3498000846394120	F	F	F
0.5702621035290605	0.6002333619871152	0.3377948166808480	F	F	F
0.5198187726736379	0.4710367487921232	0.3758420117279684	F	F	F
0.9426805682623609	0.3924764106726286	0.4077528311564294	F	F	F
0.4180544851025232	0.1777170637495047	0.4180630728800807	F	F	F
0.1697176184977991	0.8957742608203105	0.4059099647347324	F	F	F
0.0157015007558172	0.5134525626218860	0.3758420117279684	F	F	F

0.6712180398470551	0.9354949379856805	0.4077528311564294	F	F	F
0.4114658565705795	0.4116378360625106	0.4180630728800807	F	F	F
0.9398975868734993	0.1628324598200166	0.4059099647347324	F	F	F
0.4767584900125641	0.0098831757007858	0.3758420117279684	F	F	F
0.3993614858472370	0.6636585286003154	0.4077528311564294	F	F	F
0.1841461447858563	0.4047562752544636	0.4180630728800807	F	F	F
0.9035843176360459	0.9330345621793654	0.4059099647347324	F	F	F
0.1547644004390776	0.1916458452052581	0.4119880130487985	F	F	F
0.7307997352263129	0.2707766336215016	0.3797524253477320	F	F	F
0.2566607160774623	0.4851340867038942	0.3698925933407295	F	F	F
0.5066993712809946	0.7643982900759099	0.3817393573504972	F	F	F
0.6603693326687292	0.1487235043712474	0.4119880130487985	F	F	F
0.0053116273190454	0.7243880503595861	0.3797524253477320	F	F	F
0.2643070694647278	0.2506682497746482	0.3698925933407295	F	F	F
0.7342339744034376	0.4998948800842840	0.3817393573504972	F	F	F
0.1983330781461632	0.6537794249032487	0.4119880130487985	F	F	F
0.2762959286617175	0.9991836010246260	0.3797524253477320	F	F	F
0.4911154325054667	0.2586069723533484	0.3698925933407295	F	F	F
0.7714717372890760	0.7274977081085865	0.3817393573504972	F	F	F
0.8347145505772549	0.8506211148047403	0.5446612245438994	T	T	T
0.8545404632274897	0.8019161494655226	0.4439765583499183	T	T	T
0.2771040938046395	0.7297316268653855	0.4748017605240083	T	T	T
0.4150572461668817	0.9274421249629192	0.5153576395234770	T	T	T
0.7519932704120074	0.5133782025367365	0.4898627114238779	T	T	T
0.9340908266422441	0.1464530930018466	0.5048991894183484	T	T	T
0.5032767647417958	0.2286016894437889	0.4737501049644504	T	T	T
0.1852592848622409	0.4260680138274481	0.5197547803121173	T	T	T
0.3328657181144781	0.8186522156849910	0.5439912431612091	T	T	T
0.3495889516612631	0.8488372273194971	0.4433776466674911	T	T	T
0.0032573232724539	0.2709764918374945	0.4735953813099313	T	T	T
0.6627286414236399	0.3949551342323124	0.5141668653728505	T	T	T
0.7435879520711131	0.7487440120925620	0.4889323961273124	T	T	T
0.9399987921323139	0.9174906533685446	0.5053078113715690	T	T	T
0.2727207997707552	0.4971648139419871	0.4737102570182870	T	T	T
0.4010031156213376	0.1696339755676599	0.5184578602398245	T	T	T
0.8544646748662078	0.3307290862035517	0.5412577469222078	T	T	T
0.8081329004019996	0.3455581887516690	0.4440077500848068	T	T	T
0.7383861951959894	0.9956177123413428	0.4759381061646054	T	T	T
0.9439405140687331	0.6595674332425933	0.5145980465748214	T	T	T
0.5148011268393150	0.7396883493623860	0.4858352568807612	T	T	T
0.1508700886231707	0.9274637889921450	0.5067842090346875	T	T	T
0.2369936333229800	0.2651286678947160	0.4748546327479687	T	T	T
0.4330722846169178	0.3919412997577510	0.5180685027292181	T	T	T
0.4817137389378148	0.5232818756596161	0.4764974075355752	T	T	T

0.1794828512578355	0.1301084173343577	0.5080151650085226	T	T	T
0.6102265182475755	0.0633052079151120	0.5409079390535290	T	T	T
0.0672338802989323	0.6007265510290808	0.4477455786939554	T	T	T
0.0824012276451510	0.8550012276885730	0.5538254123902084	T	T	T
0.5954745251043044	0.8160839552427399	0.4383018334861170	T	T	T
0.0024941416486694	0.5368913165769590	0.5769728473854258	T	T	T
0.8413722140354651	0.0984614832822178	0.4493820091749617	T	T	T
0.9981739374472334	0.4779003163308775	0.4801779091224757	T	T	T
0.6868741739700318	0.1808578231803616	0.5103902459565834	T	T	T
0.3330152081962798	0.6001361960012513	0.5422179181242663	T	T	T
0.3382730312684341	0.0600765486846107	0.4476354939177331	T	T	T
0.0797131219965033	0.0723259160782331	0.5537595700180776	T	T	T
0.5992274804229921	0.5845642520049150	0.4383155926694242	T	T	T
0.6313433892602218	0.8622263098782814	0.5497303802343954	T	T	T
0.0682446900381573	0.8341658322230519	0.4491632884998630	T	T	T
0.5323078670175403	0.9904941289984386	0.4783751689052715	T	T	T
0.1427227111615584	0.6854338943495556	0.5087683279422317	T	T	T
0.0766730747309672	0.3232815122117714	0.5411724748940653	T	T	T
0.6096007765827834	0.3288792117307052	0.4476605669855340	T	T	T
0.8635550776709922	0.0691532143385892	0.5511835800588093	T	T	T
0.8241969855980231	0.5900114421004420	0.4389810806467885	T	T	T
0.5547160357279051	0.5975700171994650	0.5337107750491165	T	T	T
0.1042470985771318	0.0608346336785174	0.4488882601820405	T	T	T
0.6733045360052063	0.3029394325887466	0.5738751766368492	T	T	T
0.0888031721173041	0.6469585554141534	0.5670711315527401	T	T	T
0.2989206308078524	0.0902274616887502	0.5590645169972905	T	T	T
0.5334395941646758	0.2504602898014203	0.5742158541808950	T	T	T
0.7127019233979967	0.2857533597385665	0.5926801548170133	T	T	T
0.1135820117300617	0.6688606601184977	0.5844519131555500	T	T	T
0.2819661900868605	0.1047248188723758	0.5803545871580932	T	T	T
0.5925731387873145	0.2722489437260426	0.5758944757826463	T	T	T
0.5688806602152557	0.1752596384510218	0.5792236112803902	T	T	T
0.0839015885509384	0.8617872045147450	0.5756393714962180	T	T	T
0.0626511658026983	0.0828145874853718	0.5751646069193390	T	T	T
0.0281454714958194	0.5906195614483151	0.5756141206182925	T	T	T
0.8489795063833033	0.5803019230922115	0.5702757351364462	T	T	T
0.7022040804670140	0.5466063915901384	0.5883027884828859	T	T	T
0.6407687725898744	0.7272849773838299	0.5663989914326634	T	T	T

Best + 1:

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000  
-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O H Pt  
56 8 100 8 3

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7594515692870303	0.0043185196671395	0.6404052302013943	T	T	T
0.9087543013287768	0.6511565474803067	0.5887490266825043	T	T	T
0.4266473630154463	0.6809111302963092	0.5848514020974759	T	T	T
0.9273972395720465	0.1769327873294243	0.5822797543475280	T	T	T
0.4032505468163085	0.1554245700112624	0.5911171316599533	T	T	T
0.2461787461690342	0.7457531024300057	0.6374428077061062	T	T	T
0.4420306432936768	0.9045909208053698	0.5892801102250066	T	T	T
0.8965809881211657	0.4256206471509675	0.5824294050378225	T	T	T
0.7647113291210801	0.2513975489994284	0.6471960669437496	T	T	T
0.8927638444792643	0.9271563481491457	0.5820853863254295	T	T	T

0.4404190619742592	0.3994810247203209	0.5906339827678015	T	T	T
0.2269693495104775	0.2451612666469880	0.6420240106433888	T	T	T
0.0071483848677717	0.2384593857620086	0.6398149469652602	T	T	T
0.6514971261614607	0.4407162709312228	0.5896628049022397	T	T	T
0.6785725273495288	0.8932220046357313	0.5814206236462143	T	T	T
0.1756572851715095	0.8927607335816647	0.5820027570612868	T	T	T
0.1571767233835488	0.4338019159743485	0.5912552514154118	T	T	T
0.5157877871084732	0.2239171837579353	0.6415369248528786	T	T	T
0.6715480922534043	0.6642973880174555	0.5839904993560395	T	T	T
0.0078354381935944	0.5043097481938064	0.6458078360261473	T	T	T
0.6679939895612809	0.1642142392533261	0.5867188622489010	T	T	T
0.4808548844434271	0.5246386658436897	0.6416670801482397	T	T	T
0.1664396787088717	0.1617975281910430	0.5865839126667889	T	T	T
0.5087224533938010	0.9930876692470344	0.6428237721584494	T	T	T
0.1621404419261193	0.6658004562007656	0.5858387243974045	T	T	T
0.2469011127737082	0.9908988548561058	0.6542206123797170	T	T	T
0.2622342020735286	0.5093151833944713	0.6390808538698181	T	T	T
0.9938695842423151	0.7651393314316415	0.6499121640159220	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7408382941824878	0.4974161477489544	0.6474635741816408	T	T	T
0.7764096340968257	0.7389337472739110	0.6445291293738359	T	T	T
0.5004791463205567	0.7627549875119133	0.6454276789296625	T	T	T
0.0034218229003757	0.9952871826982007	0.6431318955341673	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F

0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8212940423090315	0.8443458069937413	0.6579514730303953	T	T	T
0.8506443415565388	0.8042666300482042	0.5704343301163063	T	T	T
0.2632518250693922	0.7285252035395261	0.5944166825044234	T	T	T
0.4028085822935220	0.9257441630948600	0.6335217797292505	T	T	T
0.7504152493636542	0.5132320844188983	0.6076214368291319	T	T	T
0.9234218916947032	0.1468757119649064	0.6250245592544904	T	T	T
0.5001761651357989	0.2272270939472663	0.5974609527117195	T	T	T
0.1797259858159887	0.4249687769537400	0.6363877579748147	T	T	T
0.4096702750723903	0.6986157175598083	0.6296691860850507	T	T	T
0.3445436370231969	0.8492068091293199	0.5713810631329808	T	T	T
0.9986838858000309	0.2694168370513745	0.5975297185016522	T	T	T
0.6532753322132147	0.4135427098835505	0.6321127355536235	T	T	T
0.7429742102539978	0.7465458759216251	0.6056862625214642	T	T	T
0.9266210350130666	0.9230855537744462	0.6250056466849608	T	T	T

0.2674110287146617	0.4948432503234935	0.5961005443099053	T	T	T
0.3966407798267541	0.1657568285923083	0.6352964308716391	T	T	T
0.8487329286688652	0.3404068697465880	0.6536400835210578	T	T	T
0.8052305866301247	0.3446013092481987	0.5712501401247033	T	T	T
0.7302969707189511	0.9961633160722952	0.5980779874167690	T	T	T
0.9349294364890131	0.6699630781544077	0.6291910486446802	T	T	T
0.5305317346644060	0.7450555421556094	0.6058316450626122	T	T	T
0.1480194737422169	0.9269821157181748	0.6241041671857310	T	T	T
0.2316272119268969	0.2644760289304564	0.5980077340022635	T	T	T
0.4367137514501866	0.3946803563041715	0.6336626034372541	T	T	T
0.4796721448678302	0.5220897807944243	0.5985445358155711	T	T	T
0.1754096983741834	0.1304719108164899	0.6284081896825514	T	T	T
0.6043279836389633	0.0566768324806841	0.6541859923763181	T	T	T
0.0632435276042607	0.6000295190362327	0.5737352997158808	T	T	T
0.0620660238673678	0.8696853231338313	0.6686046414564060	T	T	T
0.5884249549291004	0.8203176329351883	0.5647346533118572	T	T	T
0.8312203517219424	0.5811993676598922	0.6544261173220797	T	T	T
0.8363208107801257	0.0992090049403220	0.5759550940534223	T	T	T
0.9935412383584992	0.4804547115948570	0.6023898654929690	T	T	T
0.6857579868922717	0.1771978017974930	0.6288878614756496	T	T	T
0.3249789630277173	0.5919865255246463	0.6579903031729882	T	T	T
0.3329226577006034	0.0611945906404788	0.5744694373429672	T	T	T
0.0566711817009969	0.0905660624640831	0.6654335276689892	T	T	T
0.5920968071330107	0.5867227748747729	0.5660073551408383	T	T	T
0.6153593486955454	0.8233362962035017	0.6522646425500681	T	T	T
0.0593250664645320	0.8362521435448159	0.5757056013776245	T	T	T
0.5262295022518786	0.9895700898635668	0.6005602002131782	T	T	T
0.1382021045101055	0.6818001946040825	0.6283125479315256	T	T	T
0.0647981201755136	0.3378404858596844	0.6552660933839715	T	T	T
0.6072516197959419	0.3287187827023522	0.5743212555675457	T	T	T
0.8509905269663064	0.0730744505252291	0.6642834109341880	T	T	T
0.8251042459135226	0.5885799422136361	0.5654050131715944	T	T	T
0.6106406209364085	0.4759675339271603	0.7018846712111975	T	T	T
0.0987882800902059	0.0621187839282943	0.5756051381683460	T	T	T
0.6855630306609791	0.2870265539733598	0.6846253280520238	T	T	T
0.0447461383780459	0.6125128663801168	0.6717507465707303	T	T	T
0.2862339313874961	0.1065742368749756	0.6719215447826525	T	T	T
0.5268532378448033	0.2605956207468352	0.6811848046920513	T	T	T
0.8549860265194245	0.0635757214588448	0.6830109156885100	T	T	T
0.6581857476753874	0.3628920297922014	0.6915217499348839	T	T	T
0.0559674590427289	0.6048634531021311	0.6903633064333689	T	T	T
0.2791022983778780	0.1172934316106069	0.6905592715342350	T	T	T
0.6194045145209509	0.2760381318978434	0.6839136647632056	T	T	T
0.5463128192570437	0.1949381206852071	0.6901934931197509	T	T	T



0.0466515221479944	0.0914440372577379	0.6841100817544107	T	T	T
0.6588714767034789	0.4765003708057190	0.7147914117686494	T	T	T
0.5767948984384592	0.6001983009527313	0.6763157669522301	T	T	T
0.4056483182874258	0.7967641302485556	0.6897667443983330	T	T	T
0.2157890074590023	0.8504775138985079	0.6799668511032677	T	T	T

Best + 2:

In Sn O Pt H

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O Pt H

56 8 100 3 8

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F

0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7569923487183131	0.0067499757713132	0.6398957778431305	T	T	T
0.9074604053814609	0.6502270039263570	0.5890223560627926	T	T	T
0.4271218043470404	0.6760470888714786	0.5823900458543392	T	T	T
0.2363851390979918	0.9833598864782317	0.6490809295913149	T	T	T
0.9271726667415029	0.1769385303871847	0.5823523177719196	T	T	T
0.4040453891459747	0.1565715846380559	0.5905953498449029	T	T	T
0.2609337448287635	0.5135249277774632	0.6409874601197743	T	T	T
0.2345068922303008	0.7522608203100986	0.6380604215281909	T	T	T
0.4405297622996212	0.9060620661788277	0.5893254622777325	T	T	T
0.8944235677817736	0.4236031596641937	0.5821172068606861	T	T	T
0.7627572364582773	0.2504873265733364	0.6490225960977016	T	T	T
0.8934103202557253	0.9278388965902228	0.5820213218800048	T	T	T
0.4399060856211927	0.4052838749220860	0.5913871470679946	T	T	T
0.2231121698455812	0.2598470983124324	0.6383052410936827	T	T	T
0.0151719858906235	0.2224857961125580	0.6411010971764604	T	T	T
0.6517035300414639	0.4421518282195718	0.5899994496040549	T	T	T
0.6798127434353703	0.8924101052272788	0.5813493359169271	T	T	T
0.9852460687152833	0.7691069184845469	0.6483436053757835	T	T	T
0.1775352787245532	0.8913057775146638	0.5816936015755694	T	T	T
0.1580276854051223	0.4385423759550690	0.5905208420154210	T	T	T
0.5150660674475623	0.2240710754563993	0.6412684659063120	T	T	T
0.6679988481544948	0.6642363784719505	0.5855428833061720	T	T	T
0.9971671319907395	0.4894456930646911	0.6422280820572567	T	T	T
0.6670699625660214	0.1658289038118154	0.5865033457019257	T	T	T
0.4992805675548034	0.4950497993868438	0.6481846340413189	T	T	T
0.1659365263397835	0.1633053239403965	0.5862288679238802	T	T	T
0.5121411024728447	0.9968269443770239	0.6421410982667526	T	T	T
0.1648733853566618	0.6656183183904454	0.5861155713418612	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7446457736333916	0.4854669268804007	0.6488385505553209	T	T	T
0.7727256851904489	0.7349884301843836	0.6453103664246965	T	T	T
0.4878325551203005	0.7843257138304086	0.6457242278936418	T	T	T
0.9989787064526853	0.0039919838759510	0.6428247520311541	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F

0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8131697652910373	0.8474460375119375	0.6555163536230304	T	T	T
0.8512529786777592	0.8037281629979278	0.5708992956539053	T	T	T
0.2695550711729965	0.7265392999468510	0.5960640849006354	T	T	T

0.4038243940953292	0.9409300704171443	0.6327278407466165	T	T	T
0.7495572686069564	0.5144872676861995	0.6084909240704884	T	T	T
0.9133228721702934	0.1490178599105481	0.6242632361859370	T	T	T
0.4981218072009991	0.2311653316908549	0.5976272584740348	T	T	T
0.1697701268083285	0.4332942417558199	0.6350070667943652	T	T	T
0.3353463850175157	0.8126264755432844	0.6455546068196406	T	T	T
0.3451755608934588	0.8481619355715049	0.5711910721938952	T	T	T
0.0002381797973424	0.2668760222250193	0.5984843501018418	T	T	T
0.6630339803462634	0.4097269296916106	0.6311652843712080	T	T	T
0.7431399881686970	0.7444032984440838	0.6061324879968099	T	T	T
0.9258467546829905	0.9254792776328572	0.6256263011389047	T	T	T
0.2693261640060746	0.4972611106513519	0.5971447114451668	T	T	T
0.3926238339846736	0.1702691276317143	0.6366528954198475	T	T	T
0.8583254663800530	0.3293126653320435	0.6535079783069733	T	T	T
0.8045236908153589	0.3438568094322035	0.5712034258833690	T	T	T
0.7302365397489209	0.9970741012523502	0.5977582824258747	T	T	T
0.9370721146576493	0.6584327423825918	0.6319218492520785	T	T	T
0.5159769121002058	0.7383613450936620	0.6071126129318691	T	T	T
0.1409875538439803	0.9234006456950015	0.6231319688248776	T	T	T
0.2327324262904196	0.2679673422216098	0.5960178612359475	T	T	T
0.4321864275078953	0.3926202744741619	0.6352611220443272	T	T	T
0.4815996272926143	0.5271462579481165	0.6029112847941558	T	T	T
0.1863072381432027	0.1319928131794647	0.6286413204794871	T	T	T
0.6028982144927570	0.0610869869862144	0.6556457721458813	T	T	T
0.0626801934413335	0.6024855553533270	0.5742936527372569	T	T	T
0.0759702579287752	0.8542338602539773	0.6642333540239744	T	T	T
0.5871504582915332	0.8189194208494419	0.5658097339973870	T	T	T
0.8265276102828301	0.5734418705105871	0.6547898781562708	T	T	T
0.8357331400093744	0.0994324814938643	0.5757718987505527	T	T	T
0.9935355507797766	0.4771040050744068	0.6002572626760452	T	T	T
0.6836943511235922	0.1772425010531127	0.6287887436752151	T	T	T
0.3342232124109572	0.6004200392808228	0.6543570347613663	T	T	T
0.3327603824232124	0.0619769700098487	0.5745677215362639	T	T	T
0.0680730302812833	0.0735255949387575	0.6628823411640988	T	T	T
0.5917496638604917	0.5860486217882269	0.5659404212920466	T	T	T
0.6095131068919039	0.8248300483640983	0.6507415629068047	T	T	T
0.0613754254346862	0.8349567132217012	0.5760476495756423	T	T	T
0.5276616074162753	0.9925620136404495	0.5999827449980075	T	T	T
0.1350508387867456	0.6804221239859793	0.6286586993050201	T	T	T
0.0693797699594138	0.3291090509092570	0.6555000671092602	T	T	T
0.6042347218747124	0.3328002956342743	0.5747202259598780	T	T	T
0.8515691649449134	0.0718557669897241	0.6659233766001265	T	T	T
0.8215438601501840	0.5892761261462645	0.5657362936249639	T	T	T
0.5248176221526726	0.2515261739026352	0.6834610455141720	T	T	T

0.1000029200453891	0.0612700216099609	0.5758395528668141	T	T	T
0.2979967066744023	0.9666151074684970	0.6870315814723231	T	T	T
0.2058583283508669	0.5213845550272045	0.6827740716512533	T	T	T
0.0373237786817793	0.6948606898055797	0.6856374794557284	T	T	T
0.4771984318538147	0.7866970618395717	0.6872434975767691	T	T	T
0.6830007386433804	0.4466876723055058	0.6933512948457153	T	T	T
0.6063384443436297	0.3321611751853989	0.6842067229763765	T	T	T
0.5557706393524753	0.6268335650513447	0.6781081758116370	T	T	T
0.2400622912487702	0.0000374275361777	0.6992767661117391	T	T	T
0.5678495361351076	0.1783265147171552	0.6891000852631399	T	T	T
0.1338127297200848	0.5929836309434035	0.6854516948028020	T	T	T
0.1909082267809649	0.4648426529136253	0.6861752884059898	T	T	T
0.9801411287469441	0.7013479073072230	0.6964540318795426	T	T	T
0.0802429477157767	0.8483545119845904	0.6830591837448777	T	T	T
0.3990734920270610	0.8353048768789496	0.6901979525561212	T	T	T
0.8582940818756084	0.0641517794850747	0.6846888783502475	T	T	T

Best + 3:

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 3

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316	0.0111196284508281	0.4659634855339050	F	F	F
0.2397990222127078	0.9863352678444528	0.4737760756088107	F	F	F
0.7715588052310096	0.2382440998621718	0.4737760756088107	F	F	F
0.0114253481492099	0.2271244657591041	0.4659634855339050	F	F	F
0.9885071424342016	0.7703304135794511	0.4737760756088107	F	F	F
0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F

0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7561305423953467	0.0063610052231044	0.6407329855816115	T	T	T
0.9091722074225976	0.6505001218420483	0.5895264640650625	T	T	T
0.4256305140434102	0.6788982472612642	0.5823822950632982	T	T	T
0.9266524939981303	0.1765962700666742	0.5822559774633644	T	T	T
0.4036488423052213	0.1547200452701933	0.5907877896589686	T	T	T
0.2338467476438207	0.7518585883712715	0.6407702059632087	T	T	T
0.4409270053868483	0.9038519427510699	0.5894613785101261	T	T	T
0.8963891763872089	0.4255688180834312	0.5813523116547571	T	T	T
0.7586769419924888	0.2527543126021289	0.6493993220983654	T	T	T
0.8943400336826105	0.9269385015242847	0.5826055955725544	T	T	T
0.4378081377608432	0.4040777619158802	0.5915058444314977	T	T	T
0.2259277805300508	0.2486322250836470	0.6407483277432879	T	T	T
0.0032099630807464	0.2398941287768763	0.6393208016115157	T	T	T
0.6519460563568813	0.4401554593034251	0.5890990599617475	T	T	T
0.6786445586454690	0.8938174910455146	0.5817349914058296	T	T	T
0.1769605850550372	0.8925885357138105	0.5825667081605953	T	T	T
0.1578814180902749	0.4355027121003000	0.5910644215586395	T	T	T
0.5112808822506213	0.2269324246696422	0.6405403615079552	T	T	T
0.6694207642866943	0.6651057686747329	0.5836044562523999	T	T	T
0.0035636619896068	0.4911909685756425	0.6450626351258948	T	T	T
0.6665541665630909	0.1655868965702317	0.5867171237337377	T	T	T
0.4970144409437811	0.5238746317729069	0.6440040074486987	T	T	T
0.1647692680438957	0.1663154834805664	0.5851966716469426	T	T	T
0.5039296794162569	0.9949604369957593	0.6439543347837492	T	T	T
0.1669100584502646	0.6649632504520182	0.5859078039183725	T	T	T
0.2380349525010239	0.0034435661461356	0.6486598359868131	T	T	T
0.2549581389305274	0.5100665639676932	0.6418063382285771	T	T	T
0.9902225120279555	0.7602634731902116	0.6502436722206717	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F

0.7481252056135593	0.4896361090851744	0.6446273167990163	T	T	T
0.7725569165720207	0.7354182992546612	0.6453149120143102	T	T	T
0.5056476618359922	0.7553683239413954	0.6449524911850097	T	T	T
0.9966207347841662	0.0046593166879236	0.6456850688810690	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F
0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F

0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8147754678922372	0.8457015481372994	0.6561528553924398	T	T	T
0.8505430321201660	0.8046003027792147	0.5712045962008662	T	T	T
0.2680512763458291	0.7311517904710635	0.5978160627811908	T	T	T
0.4009099380730991	0.9208918864457479	0.6347387892265954	T	T	T
0.7514560328853074	0.5124927675473447	0.6056791214398540	T	T	T
0.9215919096731787	0.1492921019692743	0.6261597590685265	T	T	T
0.4979585540948716	0.2298706165345650	0.5971640402115296	T	T	T
0.1749760728759268	0.4235195484088810	0.6351022972206353	T	T	T
0.3975985512003786	0.7059107293391212	0.6441653281487142	T	T	T
0.3438476064093043	0.8489603943392217	0.5712628255144628	T	T	T
0.9956147949942018	0.2703876415237789	0.5971501682068522	T	T	T
0.6623794785280631	0.4100437875224072	0.6315908561408633	T	T	T
0.7412845928990832	0.7453298960807758	0.6062692206969027	T	T	T
0.9309306119503962	0.9224878556772900	0.6271769476232485	T	T	T
0.2676468122374974	0.4969229469205597	0.5974760555020631	T	T	T
0.3948706335728286	0.1678343890996592	0.6350788602033333	T	T	T
0.8478922790072703	0.3394616063492188	0.6565128280100171	T	T	T
0.8043887479010825	0.3430065916014742	0.5709401527324524	T	T	T
0.7312258632086944	0.9968102834166638	0.5984422617024936	T	T	T
0.9359711716096737	0.6599869043465423	0.6318391480163756	T	T	T
0.5217651305842613	0.7372805707886207	0.6055719335284154	T	T	T
0.1521636256225192	0.9250299456908189	0.6287654460322147	T	T	T
0.2331027833911977	0.2656544927589187	0.5967574445178375	T	T	T
0.4311496374948199	0.4003302129631524	0.6346211766473827	T	T	T
0.4806306614795743	0.5284920626520309	0.6013817218045229	T	T	T
0.1725660500117001	0.1388103612989475	0.6257089859023860	T	T	T
0.6000413236733548	0.0595091232835070	0.6546622498315668	T	T	T
0.0636206799350729	0.6013067272723340	0.5742704177697096	T	T	T
0.0364852770897703	0.9430499270016611	0.6815880727578614	T	T	T
0.5868391740000908	0.8209438311229670	0.5653239926346579	T	T	T
0.8253593256397066	0.5730915898905611	0.6535853407002361	T	T	T
0.8359486460640621	0.0989775144973987	0.5764664525555852	T	T	T
0.9928617547975388	0.4786504253888693	0.6016957090386693	T	T	T
0.6798880919646373	0.1809955665866020	0.6289476608524914	T	T	T
0.4531989677426969	0.5151703567311610	0.6820224175995506	T	T	T
0.3335496851052859	0.0600030883318222	0.5744345227628619	T	T	T



0.0704902737443405	0.0947142013711597	0.6652233028225478	T	T	T
0.5916605448907126	0.5855534069985304	0.5655854578615912	T	T	T
0.6074665413017786	0.8167145229224051	0.6537046965496051	T	T	T
0.0620195884555516	0.8361310656520914	0.5763485464109634	T	T	T
0.5257859831312215	0.9874597960438566	0.6014982088448695	T	T	T
0.1384866004338123	0.6795837330513927	0.6270493489088037	T	T	T
0.0665993652069544	0.3289364563819462	0.6551517724503312	T	T	T
0.6027273557587551	0.3323000366393319	0.5748289531800748	T	T	T
0.8376950302457742	0.0824963912847700	0.6649409340481263	T	T	T
0.8242477641984152	0.5905675913763929	0.5653719674913936	T	T	T
0.6029374426184471	0.5988810426822684	0.6560450342239109	T	T	T
0.0990535510227105	0.0606694270342350	0.5762790938952441	T	T	T
0.6674460658299393	0.2914845630876597	0.6843077827531072	T	T	T
0.0280951803951052	0.5254377343219644	0.6851095340482388	T	T	T
0.2887128126884083	0.1007062124826384	0.6706838396986911	T	T	T
0.5241980179064212	0.2466326188172815	0.6828377289286670	T	T	T
0.8513762858344263	0.0659613909100875	0.6833624613206621	T	T	T
0.6311829177684375	0.3659765353755111	0.6889684746676579	T	T	T
0.9633330378693334	0.5612262558071764	0.6951633747194162	T	T	T
0.2656102703602959	0.1187771719606798	0.6885827299791337	T	T	T
0.5854019588769482	0.2675755471720482	0.6844844694410164	T	T	T
0.5576360643187149	0.1718141281187093	0.6873380828801124	T	T	T
0.0599015641599264	0.0880986225575398	0.6836549911068336	T	T	T
0.1788627760373968	0.6616728655376409	0.6994149189926728	T	T	T
0.3014789769313587	0.5959239829615095	0.6814685419977931	T	T	T
0.1098473308199177	0.6050025083990839	0.6854209864220564	T	T	T
0.1153357184219456	0.7886774140181475	0.6832296454963005	T	T	T

Best + 4:

In Sn O H Pt

1.0000000000000000

14.6581653332033461 0.0000000000000000 0.0000000000000000

7.3189795989957736 12.7095316657975506 0.0000000000000000

-0.0098891034462902 -0.0168642175486257 51.7150080587397056

In Sn O H Pt

56 8 100 8 3

Selective dynamics

Direct

0.7601334683925316 0.0111196284508281 0.4659634855339050 F F F

0.2397990222127078 0.9863352678444528 0.4737760756088107 F F F

0.7715588052310096 0.2382440998621718 0.4737760756088107 F F F

0.0114253481492099 0.2271244657591041 0.4659634855339050 F F F

0.9885071424342016 0.7703304135794511 0.4737760756088107 F F F

0.9992903736448469	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.5006083460974438	0.9974548753487298	0.4698697869370179	F	F	F
0.5711026190239110	0.3212438999490672	0.5325343176450374	F	F	F
0.0957701894278102	0.3438156643639090	0.5244126049570497	F	F	F
0.5954002788407777	0.8428761420777775	0.5239512181533499	F	F	F
0.0723457897014868	0.8193845017652066	0.5323927895013369	F	F	F
0.1070648802758711	0.5700070441001301	0.5325343176450374	F	F	F
0.5592163182809529	0.0952136194229070	0.5244126049570497	F	F	F
0.5598611324288072	0.5936048851403370	0.5239512181533499	F	F	F
0.1070842580214730	0.0712056639447667	0.5323927895013369	F	F	F
0.3217649856391844	0.1062039465938440	0.5325343176450374	F	F	F
0.3449459772301964	0.5584256068562183	0.5244126049570497	F	F	F
0.8446035586083482	0.5584287540679753	0.5239512181533499	F	F	F
0.8205024372159997	0.1068647249330610	0.5323927895013369	F	F	F
0.3340676120032526	0.8312648480018296	0.5281957169818696	F	F	F
0.8324680001261981	0.3325994467597084	0.5281957169818696	F	F	F
0.3333108283129889	0.3324849635476852	0.5286123655445181	F	F	F
0.8333293577484682	0.8310454865245305	0.5281957169818696	F	F	F
0.2283736683972180	0.7592107964331092	0.4659634855339050	F	F	F
0.4999662501356283	0.4987274529686729	0.4698697869370179	F	F	F
0.7722008935562172	0.7369715375365402	0.4737760782952236	F	F	F
0.4891830112588380	0.7703304059322917	0.4737760782952236	F	F	F
0.7384810650628779	0.4876078378172437	0.4737760782952236	F	F	F
0.7553632792156803	0.0068732568909566	0.6407911817778205	T	T	T
0.9088546500717888	0.6506667641842527	0.5895198653953757	T	T	T
0.4253976158549458	0.6797586545863012	0.5821092667228059	T	T	T
0.9267602489573326	0.1768795836713761	0.5822179507812062	T	T	T
0.4032710247933825	0.1557655104284877	0.5908147565186138	T	T	T
0.2329103835975967	0.7525657914355128	0.6408213599842150	T	T	T
0.4408049977114962	0.9043756210632200	0.5895922719516097	T	T	T
0.8965789044419585	0.4263331293866576	0.5815316117458490	T	T	T
0.7602100556643220	0.2522720230363180	0.6489793833367971	T	T	T
0.8943028292306082	0.9270958925630542	0.5826053790071953	T	T	T
0.4374806350805945	0.4050404607062380	0.5913705228106375	T	T	T
0.2255942208017470	0.2500201889390377	0.6406266916011818	T	T	T
0.0035549505675374	0.2408891848616691	0.6393075687298576	T	T	T
0.6523105613449163	0.4401854714977396	0.5888177943796389	T	T	T
0.6784533672594649	0.8941544379800260	0.5817631740001229	T	T	T
0.1769383957269730	0.8929842773650664	0.5825726866947744	T	T	T
0.1568235736426813	0.4362203884931783	0.5912379918815718	T	T	T
0.5116479996888882	0.2278413824783823	0.6408419319580513	T	T	T
0.6687526821826659	0.6657462094585004	0.5836976772701822	T	T	T
0.0041747222899478	0.4939860384527771	0.6465220829241405	T	T	T
0.6663927247476221	0.1660603406418814	0.5867288432744958	T	T	T

0.4955492709895599	0.5216020040580421	0.6428643270603988	T	T	T
0.1648747553158746	0.1664364568014691	0.5852014871512917	T	T	T
0.5033033980772066	0.9957985161080126	0.6439745737359256	T	T	T
0.1671853803452791	0.6652751707657532	0.5858689240632353	T	T	T
0.2381071146134227	0.0038911314074841	0.6486965973195736	T	T	T
0.2531691490703661	0.5120834155345467	0.6419847234810787	T	T	T
0.9885843380251584	0.7613780408955110	0.6499716779315362	T	T	T
0.2277315647397131	0.2604833434644362	0.4659634882203321	F	F	F
0.5107495099301005	0.2271244581119447	0.4659634882203321	F	F	F
0.2614514102691530	0.5098470890666533	0.4659634882203321	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4698697815641637	F	F	F
0.7467225002627319	0.4910350685755295	0.6445860827688792	T	T	T
0.7727192243983222	0.7354624618579650	0.6451969067380159	T	T	T
0.5047918051907926	0.7552871911212062	0.6453009163388065	T	T	T
0.9965672890184423	0.0050055533353720	0.6457208698428993	T	T	T
0.8159599359379399	0.8579122813819282	0.4853073788173816	F	F	F
0.3952951534094780	0.9363767461815229	0.4577430201053687	F	F	F
0.9176869787037418	0.1541639962793013	0.4492957297685578	F	F	F
0.1695994874784077	0.4323415158892061	0.4596076389699917	F	F	F
0.3245503040634432	0.8138816341340984	0.4853073788173816	F	F	F
0.6662166882857647	0.3936186536121724	0.4577430201053687	F	F	F
0.9266394692931357	0.9163920824521128	0.4492957297685578	F	F	F
0.3969640192055408	0.1688408520964444	0.4596076389699917	F	F	F
0.8593547298765358	0.3231158657700490	0.4853073788173816	F	F	F
0.9383531281826833	0.6649143814923804	0.4577430201053687	F	F	F
0.1555385218810557	0.9243537025546544	0.4492957297685578	F	F	F
0.4333689782550181	0.3962725226573838	0.4596076389699917	F	F	F
0.1839725646666253	0.1395426248879019	0.4544321788212997	F	F	F
0.6046373471950943	0.0610781600883072	0.4819965375333126	F	F	F
0.0822455252339367	0.8432909133153856	0.4904438267021192	F	F	F
0.8303330131261575	0.5651133903806240	0.4801319186686825	F	F	F
0.6753821496046513	0.1835732721357388	0.4544321788212997	F	F	F
0.3337157653823439	0.6038362526576577	0.4819965375333126	F	F	F
0.0732929777215929	0.0810628271425600	0.4904438267021192	F	F	F
0.6029684344625679	0.8286140541733857	0.4801319186686825	F	F	F
0.1405777706676758	0.6743389936194006	0.4544321788212997	F	F	F
0.0615793723615283	0.3325404778970764	0.4819965375333126	F	F	F
0.8443939819834299	0.0731011501850887	0.4904438267021192	F	F	F
0.5665635222892007	0.6011823367320730	0.4801319186686825	F	F	F
0.5157033466994037	0.4720642166451867	0.5128125034488065	F	F	F
0.9382155266378476	0.3935697119943384	0.5402222571510507	F	F	F
0.4134764846239136	0.1788316355844657	0.5490782248169097	F	F	F
0.1652727673189958	0.8968637606432637	0.5386393295024519	F	F	F
0.0115860744760994	0.5144800304850392	0.5128125034488065	F	F	F

0.6667529985908658	0.9365882393736200	0.5402222571510507	F	F	F
0.4068878560599956	0.4127524079384770	0.5490782248169097	F	F	F
0.9354527360783820	0.1639219592684142	0.5386393295024519	F	F	F
0.4726430637634564	0.0109106435128155	0.5128125034488065	F	F	F
0.3948964446492127	0.6647518299181101	0.5402222571510507	F	F	F
0.1795681442550503	0.4058708471200845	0.5490782248169097	F	F	F
0.8991394664805483	0.9341240613744048	0.5386393295024519	F	F	F
0.1502529583315635	0.1927478839608767	0.5438600605743957	F	F	F
0.7266414664239278	0.2718121688495998	0.5161713476883989	F	F	F
0.2526104716998674	0.4861492806533860	0.5077022588577265	F	F	F
0.5025193335949325	0.7654379243932397	0.5178780203333417	F	F	F
0.6558578905342074	0.1498255430760409	0.5438600605743957	F	F	F
0.0011533585709813	0.7254235855908746	0.5161713476883989	F	F	F
0.2602568251204715	0.2516834436997044	0.5077022588577265	F	F	F
0.7300539366250547	0.5009345144027506	0.5178780203333417	F	F	F
0.1938216360732028	0.6548814636061238	0.5438600605743957	F	F	F
0.2721376599440504	0.0002191362025528	0.5161713476883989	F	F	F
0.4870651881186276	0.2596221662899509	0.5077022588577265	F	F	F
0.7672916996579389	0.7285373424900783	0.5178780203333417	F	F	F
0.8136126279559719	0.8466554796156003	0.6560776572075296	T	T	T
0.8503827184916238	0.8048057892774282	0.5711930225647635	T	T	T
0.2683448761913607	0.7317001763901705	0.5979122948951996	T	T	T
0.4007520020061637	0.9211784443681148	0.6344582877226240	T	T	T
0.7492796780798315	0.5127257240357591	0.6055403340866025	T	T	T
0.9218199836396703	0.1495672034560827	0.6261084023454527	T	T	T
0.4966680617844587	0.2328241632872680	0.5975376423666887	T	T	T
0.1764450033078347	0.4230919305820507	0.6348468540859699	T	T	T
0.3981654130787975	0.7008774109052527	0.6451354009159436	T	T	T
0.3436144057926995	0.8497373051521454	0.5712289789270243	T	T	T
0.9957655960079331	0.2707350207973752	0.5970705882002890	T	T	T
0.6609905713781562	0.4102684983160572	0.6315404530354639	T	T	T
0.7397270517803982	0.7463471553660378	0.6061598585491530	T	T	T
0.9306787648311042	0.9228471721089567	0.6272061732641742	T	T	T
0.2683773722530606	0.4970070742752378	0.5977765166145195	T	T	T
0.3947552629343405	0.1697400588303181	0.6351414982475722	T	T	T
0.8472643983200694	0.3403898033435623	0.6559688415479938	T	T	T
0.8048769257429539	0.3431128121182343	0.5709377358537283	T	T	T
0.7309697901095453	0.9974719794218323	0.5984757296531020	T	T	T
0.9343354260648001	0.6626067180053928	0.6313226582455349	T	T	T
0.5205947283777258	0.7371223967335943	0.6058464257283166	T	T	T
0.1521452859358544	0.9252613177909006	0.6288032241303916	T	T	T
0.2328822826618080	0.2660287319013999	0.5965849925247980	T	T	T
0.4335762902101279	0.4047478706986928	0.6356070019060654	T	T	T
0.4801793728194551	0.5286318853203232	0.6005170785757394	T	T	T

0.1725905061748025	0.1392281162455342	0.6257451564360793	T	T	T
0.5990339223724530	0.0608787892758321	0.6548476487574921	T	T	T
0.0637806304055009	0.6015538120964935	0.5743039949205525	T	T	T
0.0358073086777486	0.9430759049672641	0.6816319161888754	T	T	T
0.5863640098269337	0.8213837423075955	0.5653738786945212	T	T	T
0.8230138235022053	0.5749470130414627	0.6528176366524434	T	T	T
0.8358548688493623	0.0992654149246509	0.5765369136766662	T	T	T
0.9918621366993478	0.4802114589978708	0.6022774744495001	T	T	T
0.6792532245976329	0.1818422536920391	0.6290075821008418	T	T	T
0.4654973383966741	0.5180910260018378	0.6840261603605617	T	T	T
0.3336313451965711	0.0602698626186188	0.5744347424355690	T	T	T
0.0700561611278457	0.0951004903078006	0.6652019278887003	T	T	T
0.5915958637833787	0.5862311666688870	0.5654929766728813	T	T	T
0.6082250358233459	0.8166781280633539	0.6535391873492676	T	T	T
0.0620771744991368	0.8367707397868412	0.5763582165239953	T	T	T
0.5255903507037462	0.9887133338012102	0.6015282823041057	T	T	T
0.1377129230671474	0.6810981125492493	0.6268926116208140	T	T	T
0.0668759658913858	0.3295058029502523	0.6551430458113827	T	T	T
0.6028918415368177	0.3322628754370865	0.5747330033355617	T	T	T
0.8376733938590847	0.0823007905458903	0.6648476112966621	T	T	T
0.8237763868649021	0.5907019748050788	0.5654075144703746	T	T	T
0.6013793991694316	0.5977627649301737	0.6569041780105024	T	T	T
0.0990258002197682	0.0608772917412172	0.5762844910990067	T	T	T
0.6718674974580399	0.2884968164454327	0.6843358683793285	T	T	T
0.0262324822534396	0.5395025701635197	0.6841989406491017	T	T	T
0.2904747638066176	0.1000498903672789	0.6704517619935682	T	T	T
0.5241231032009801	0.2500703223744946	0.6832414256658346	T	T	T
0.8507147986709868	0.0665955574650857	0.6833153781723498	T	T	T
0.6407794009542397	0.3616655218560300	0.6897830753165698	T	T	T
0.2693248212409474	0.1173464476599322	0.6884926455635326	T	T	T
0.5873929979383958	0.2682123269559260	0.6846990050904845	T	T	T
0.5551189113091294	0.1759896631178197	0.6882398126842248	T	T	T
0.0597239400382796	0.0893088906385681	0.6836898873882842	T	T	T
0.4828857603553557	0.5693923038533055	0.6911638560418061	T	T	T
0.1738405497171756	0.6629679705817541	0.7003632745739414	T	T	T
0.2984555442084248	0.5982811177850647	0.6821396407732673	T	T	T
0.1103110844298189	0.6042723389260191	0.6846137874452246	T	T	T
0.1142483608577934	0.7889435608296315	0.6833509131282777	T	T	T