

Electronic Supplementary Information

Nanosurface-induced construction of NiCoP-CoP heterostructure nanobristle electrodes for highly efficient alkaline hydrogen evolution reaction

Peng Liu^{1,2,3,#}, Juan Wang^{1,#}, Yiming Sui⁴, Guangyao Zhao^{1,2}, Rui Yao¹, Dongsheng Xia¹, Zhenbin Guo⁵, Feiyu Kang^{1,2}, Lei Wang^{6,*}, Cheng Yang^{1,*}

1. Institute of Materials Research, Tsinghua Shenzhen International Graduate School, Tsinghua University, Shenzhen 518055, China

2. School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China

3. China Huaneng Clean Energy Research Institute, Beijing 102209, China

4. Department of Chemistry, Oregon State University, Corvallis, OR, 97331-4003, United States

5. Institute of Semiconductor Manufacturing Research, Shenzhen University, Shenzhen, Guangdong 518060, P.R. China

6. School of Materials and Environmental Engineering, Institute of Urban Ecology and Environment Technology, Shenzhen Polytechnic, Shenzhen 518055, China

[#]These authors contribute equally to this work.

*Email: yang.cheng@sz.tsinghua.edu.cn, wangleicraes@163.com

Experimental section

Materials preparation.

(a) *Preparation of nickel nanowire arrays (NNA)*. The solution A consists of 0.1 M NiCl₂, 0.2 mM chloroplatinic acid (H₂PtCl₆, heterogeneous nucleating agent), 38 mM disodium citrate (Na₂C₆H₅O₇, complexing agent), and the pH is adjusted to 12.5 with 6 M KOH and heated to 80 °C. Liquid B contains 0.1 M hydrazine hydrate solution and the pH is adjusted to 12.5 with 6 M KOH and heated to 80 °C. Nickel foam (NF) and nickel plate (the nickel plate was manually polished by sandpaper of 500 mesh for 30 s for controlling the surface roughness) were placed in the container with ethanol and dilute hydrochloric acid solution and cleaned by ultrasonic cleaner for 5 minutes. Mixed

the solution A and B in the container together and put them into the NF. Then the container was placed between the poles of the Helmholtz coil and kept the temperature at 80 °C. Turned on the Helmholtz machine and adjust the magnetic induction intensity to 0.5 T (Tesla). After a 1-h reaction, turned off the machine and took the sample out. Washed the sample with deionized water and dried it in an oven. Caution! Hydrazine hydration is poisonous and its usage should be operated in a ventilated environment.

(b) Preparation of metallic phosphide. The nickel plate was mechanically polished and the carbon cloth was cleaned by plasma in an air atmosphere for 2 minutes. Then the substrates (including nickel foam) were ultrasonicated in 1 M HCl solution for 5 minutes and in 95 wt.% alcohol for 5 minutes. We first prepared the cobalt carbonate hydroxide hydrate- $\text{Co}(\text{CO}_3)_{0.5}(\text{OH})\cdot 0.11\text{H}_2\text{O}$ (CCHH) by using 0.15 g $\text{Co}(\text{NO}_3)_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$, 0.15 g $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ (urea) and deionized water to prepare 10 mL reaction solution and putting into the substrate of nickel foam, nickel plate, carbon cloth and NNA. The 15 mL glass bottles with open pores were used as reaction containers and were put into Binder oven for 10 h at 95 °C. Then we obtained the phosphides by argon-atmosphere heat treatment in a tubular furnace. 0.5 g NaH_2PO_2 was placed in a porcelain boat close to the gas inlet and the hydroxides were placed close to the gas outlet. The saturated CuSO_4 solution was used to absorb poisonous phosphorus containing tail gas. The argon gas flow bubbled twice per second. The temperature rose 5 °C per minute and was kept at 300°C for 1.5 hours. We use the solution containing 0.075 g $\text{Co}(\text{NO}_3)_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and 0.075 g $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ to prepare NiCoP and the one containing 0.15 g $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ to prepare NiP by the same process as preparing CoP.

Calculation of active material loading (m):

$$m=M/M_1$$

where M is the mass of the sample after phosphating minus the mass of the unreacted substrate, M_1 is and the mass fraction of Co and P in NiCoP-CoP.

(c) Preparation of Pt/C@NF. The preparation method for Pt/C electrode loaded with foam nickel is to weigh 45 mg commercial Pt/C powder and pour 50 μ L Nafion, 500 μ L ethanol and 450 μ L deionized water and sonicate for 60 minutes to obtain a uniformly dispersed suspension. Then, cut a piece of foam nickel, soak foam nickel with 2 M HCl ultrasonic for 20 minutes to remove the nickel oxide layer on the surface, and then rinse it several times with deionized water and acetone and dry it.

Then immerse the cleaned foam nickel in the above suspension and dry it in the air at 60 °C for 4 hours. Finally, the loading of the Pt/C catalyst was measured to be approximately 37 mg cm⁻².

Structural and Electrochemical Characterizations.

The macro morphology and energy dispersive X-Ray spectroscopy (EDS) of catalysts was characterized by field emission scanning electron microscopy (FE-SEM, SAPHIRE SUPRA 55). The micromorphology, high-resolution transmission electron microscope (HRTEM) image, and EDS of catalysts were obtained by the TEM of JEOL ARM 200F and JEOL JEM-3200FS, made in Japan. Crystallographic information was obtained with X-ray diffraction (Bruker DSRINT2000/PC, Germany) using Cu K α radiation with $\lambda=1.5418$ Å (at a diffraction angle ranging from 20° to 80° at a scan rate of 5°/min). The X-ray photoelectron spectra (XPS) were measured with Al-K α radiation (50 W, 15 kV) (ESCALABSB 250 Xi). The shift of binding energy due to relative surface charging was corrected using the C 1 s level at 284.8 eV as an internal standard.

Electrochemical measurements were conducted with the electrochemical working station (CHI 660E) in a three-electrode electrochemical setup. A 1 M KOH solution was used as the electrolyte, and a Hg/HgO electrode (in 1 M KOH) and graphite rod (with a diameter of 8 mm) were used as reference and counter electrodes, respectively. The as-prepared electrodes supported on Ni foam were utilized as the working electrode. The working area was tailored to 0.4 cm². The relation between the Hg/HgO reference and RHE in 1 M KOH solution follows the Equation $E_{\text{RHE}} = E_{\text{Hg/HgO}} + 0.955$ V, whose value is calibrated by reversible hydrogen electrode. The iR compensation was performed by automatic current interrupt method with a value of 95% \times Ru for HER through the CH instrument 660E working station. Polarization curves were obtained from linear sweep voltammetry (LSV) test with a 5 mV s⁻¹ scan rate. Tafel slopes were calculated using the polarization curves by plotting overpotential against log (current density). Chronopotentiometry measurements were performed to evaluate the long-term stability. The ECSA was determined by measuring the capacitive current associated with double-layer charging from the scan-rate dependence of CVs. The scan rates were 20, 40, 60, 80, and 100 mV s⁻¹. The double-layer capacitance (C_{dl}) was estimated by plotting the $\Delta j = (j_{\text{a}} - j_{\text{c}})$ at 0.87 V vs RHE against the scan rate. The linear

slope is twice the double layer capacity. The ECSA values were calculated from the measured double layer capacitance divided by the specific capacitance of an atomically smooth material (C_{dl}' , $\sim 40 \mu\text{F cm}^{-2}$): $\text{ECSA} = C_{dl} / C_{dl}' \times S$, where S is the actual surface area of the electrode. The electrochemical impedance spectroscopies (EIS) measurement was conducted at -0.1 V (vs. RHE) in the frequency range from 100 kHz to 0.01 Hz with an amplitude of 5 mV .

Density Functional Theory Calculations.

All the first-principle density functional theory (DFT) calculations were performed by Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) [1-3]. The Perdew-Burke-Ernzerh (PBE) in the generalized gradient approximation (GGA) was applied to describe the exchange-correlation function [4, 5]. Based on the plane wave method, the projector augmented-wave (PAW) method with an energy cutoff of 400 eV was implemented for the electron-ion interactions [6, 7]. The van der Waals interaction was taken into account using DFT-D3 method with Becke-Jonson damping dispersion correction. All structures were fully relaxed until the electronic energy and force acting on atom were smaller than 10^{-4} eV and $0.05 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$, respectively. The Brillouin-zone sampling was conducted using Monkhorst-Pack (MP) grids of special points with a separation of 0.04 \AA^{-1} . A Gaussian smearing of 0.05 eV was applied to speed up self-consistent field iteration. A vacuum height of 15 \AA along the vertical direction was selected to avoid the unwanted interaction between the slab and its period images. The optimized structures were illustrated with VESTA software [8]. The coordinates of all computed models of both the catalysts and intermediates can be found in the Appendix at the end of Supporting Information.

According to the latest reference [9], $\text{Co}(\text{CO}_3)_{0.5}(\text{OH}) \cdot 0.11 \text{H}_2\text{O}$ should be $\text{Co}_6(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_8 \cdot \text{H}_2\text{O}$. The 2-layer slab model of $\text{Co}_6(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_8 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (001) was used to build the $\text{Ni}_{\text{bulk}}\text{-CCHH}$ and $\text{Ni}_{\text{cluster}}\text{-CCHH}$ model. The bulk Ni was considered as the infinite 3-layer of Ni(111) slab, and the Ni cluster was considered as a Ni13 cluster with a diameter of 0.8 nm , as shown in Figure 5a-b. The Ni vacancy formation energy of $\text{Ni}_{\text{bulk}}\text{-CCHH}$ ($E_{\text{Ni-bulk}}$) and $\text{Ni}_{\text{cluster}}\text{-CCHH}$ ($E_{\text{Ni-cluster}}$) of the structures was calculated through:

$$E_{\text{Ni-bulk}} = E_{\text{Ni-Vac}} + E_{\text{Ni}} - E_{\text{perfect}}$$

Where, $E_{\text{Ni-Vac}}$ and E_{perfect} are the energies of defective (with an Ni vacancy) and undefective models, respectively, and E_{Ni} is the energy of an isolated Ni atoms (treated as 0 eV in VASP).

$$E_{\text{Ni-cluster}} = E_{\text{Ni12}} + E_{\text{Ni}} - E_{\text{Ni13}}$$

Where, E_{Ni12} and E_{Ni13} are the energies of Ni₁₂-CCHH and Ni₁₃-CCHH model, respectively.

Model	$E_{\text{Ni-Vac}}$ (eV)	E_{perfect} (eV)	Ni vacancy formation energy(eV)
Ni _{bulk} -CCHH	-1129.77	-1135.16	5.39

Model	E_{Ni12} (eV)	E_{Ni13} (eV)	Ni vacancy formation energy(eV)
Ni _{cluster} -CCHH	-953.00	-957.04	4.04

References:

- [1]. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. 1993, 47, 558.
- [2]. G. Kresse, J. Furthmuller, Phys. Rev. 1996, 54, 11169.
- [3]. G. Kresse, J. Furthmuller, Comput. Mater. Sci. 1996, 6, 15.
- [4]. J. P. Perdew, Y. Wang, Phys. Rev. B 1992, 45, 13244.
- [5]. J. P. Perdew, K. Burke, Phys., Rev. Lett. 1996, 77, 3865.
- [6]. P. E. Blöchl, Phys. Rev. B 1994, 50, 17953.
- [7]. G. Kress, D. Joubert, Phys. Rev. B 1999, 59, 1758.
- [8]. K. Momma, Izumi, F. J. Appl. Crystallogr. 2011, 44, 1272.
- [9]. Acta Cryst. 2019. C75, 61-64

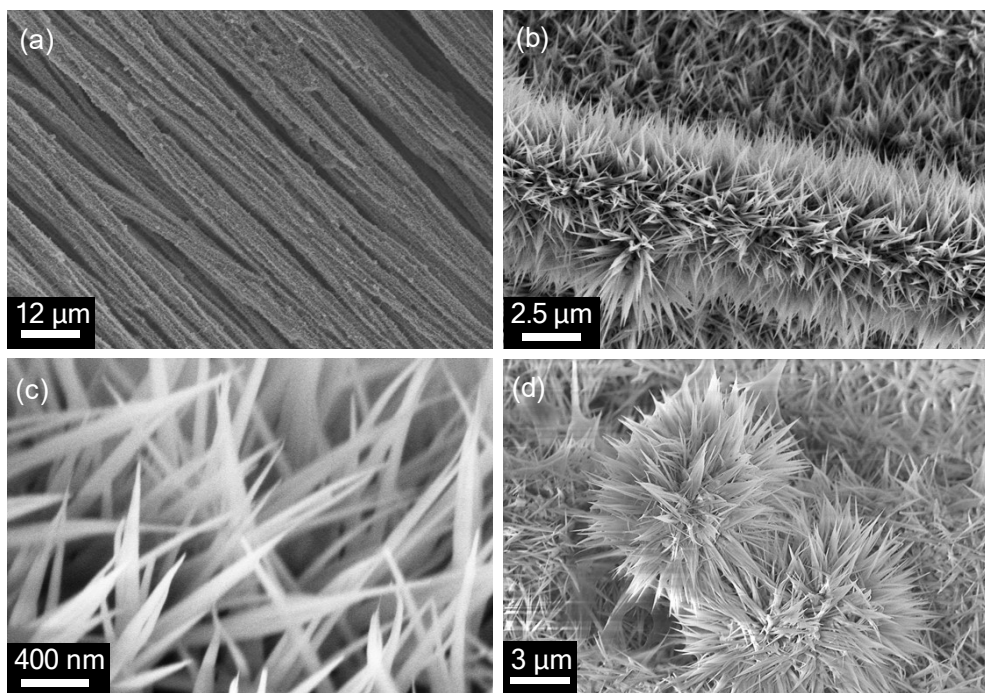


Figure S1. (a-d) SEM images of CCHH@NNA precursor.

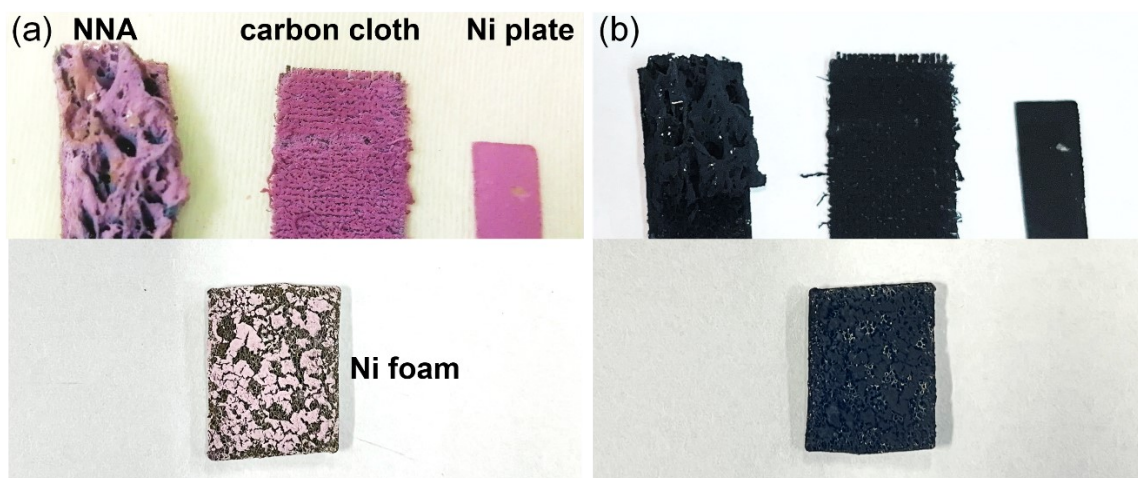


Figure S2. Optical images of (a) CCHH on NNA, carbon cloth, Ni foam, and Ni plate and (b) their corresponding phosphides

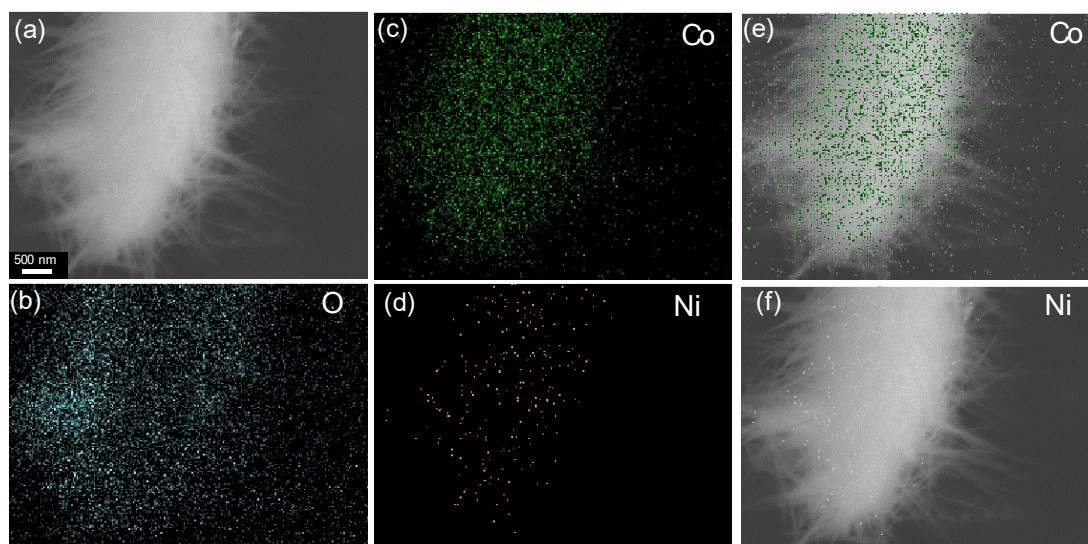


Figure S3. (a) SEM image and (b-d) corresponding EDS mapping image of CCHH@NNA precursor. The overlays of the SEM image and (e) Co and (f) Ni EDS mapping images and (f), respectively.

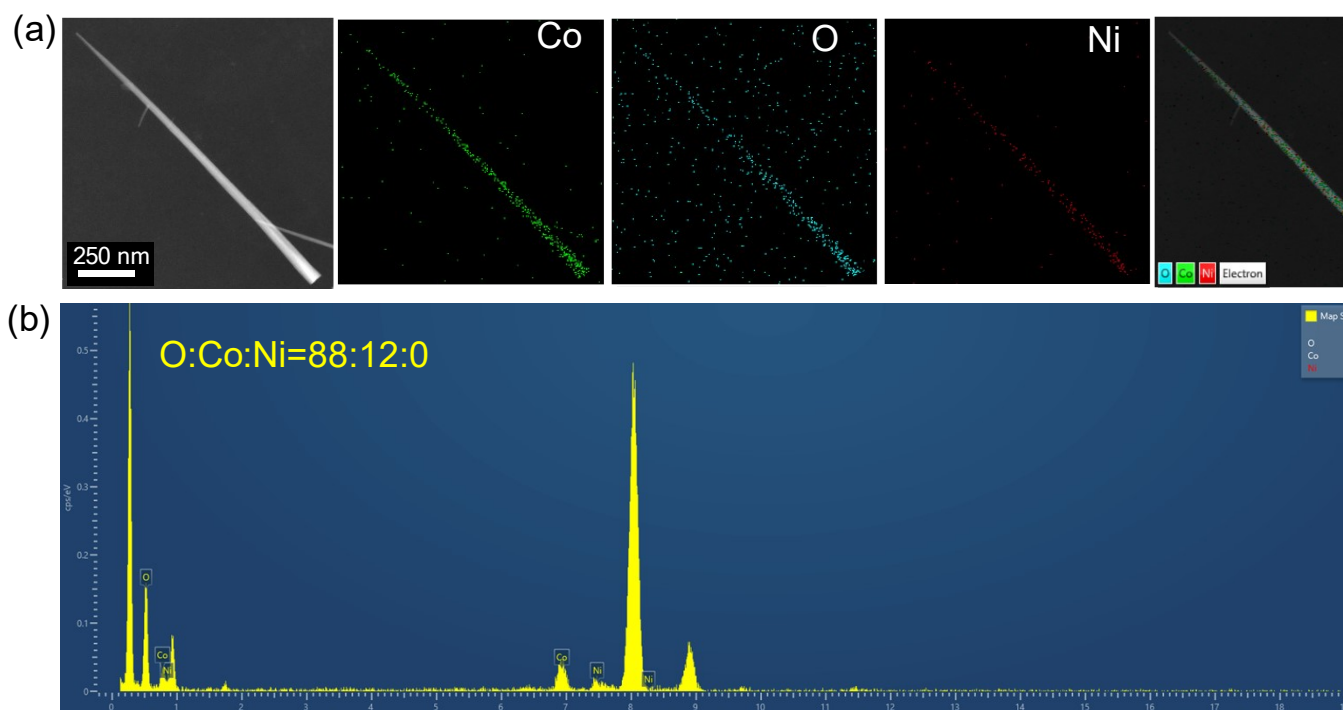


Figure S4. (a) TEM image and corresponding EDS mapping images of CCHH@NNA precursor and (b) the corresponding EDS quantitative analysis.

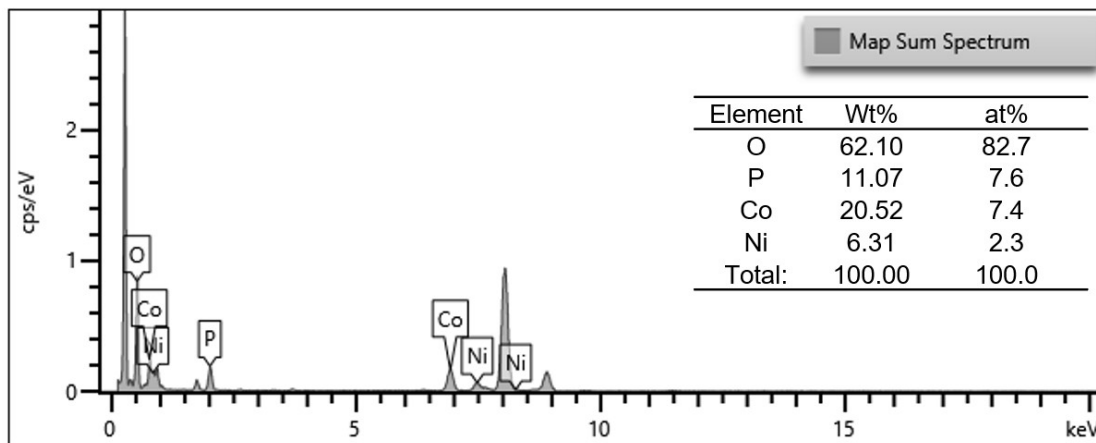


Figure S5. The corresponding EDS quantitative analysis of NiCoP-CoP@NNA in Figure 2h.

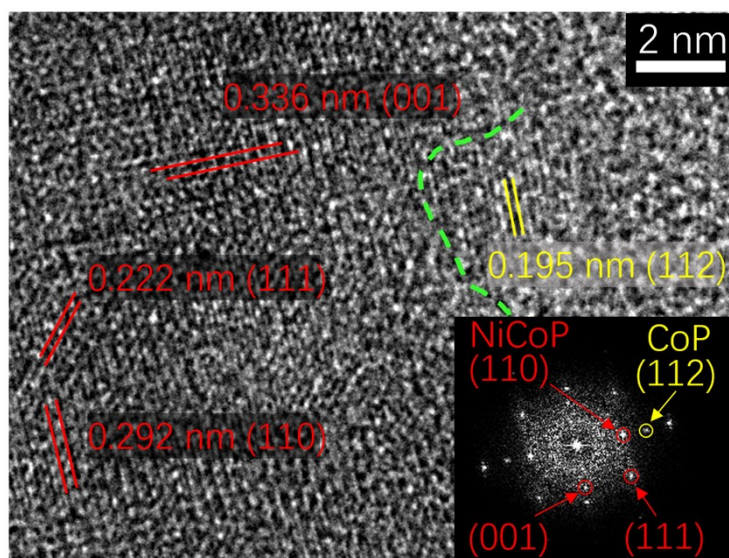


Figure S6. HRTEM of NiCoP-CoP@NNA and the fast Fourier transform (FFT) pattern of this area.

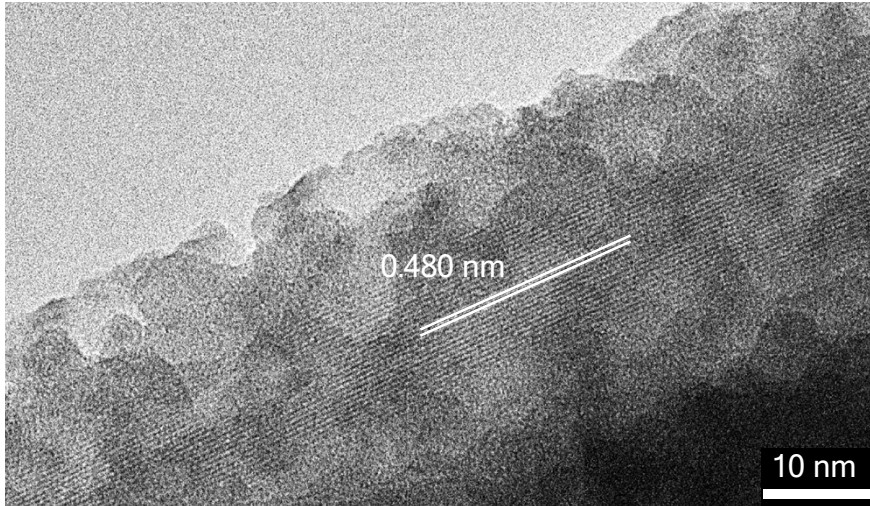


Figure S7. The HRTEM image of NiCoP-CoP@NNA surface.

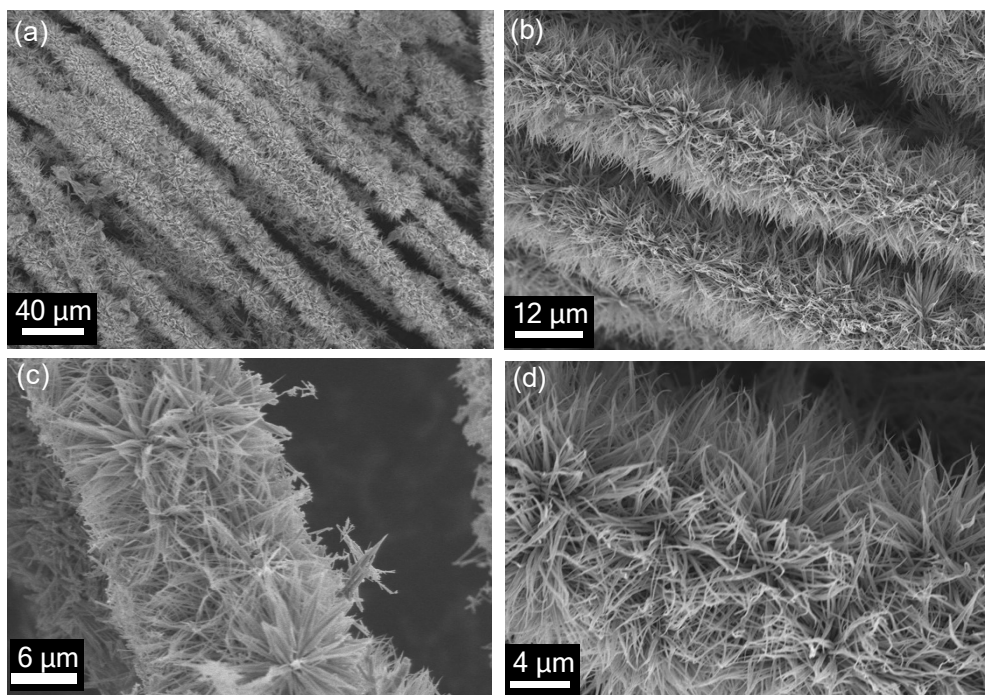


Figure S8. SEM images of CoP@carbon cloth.

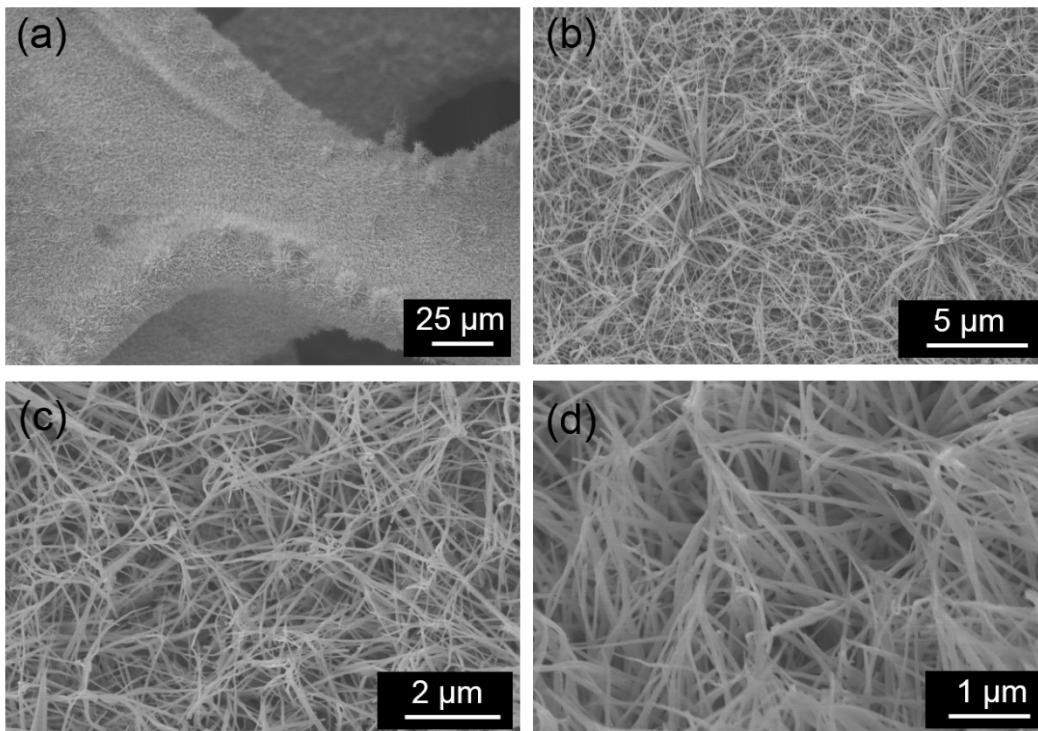


Figure S9. SEM images of CoP@NF.

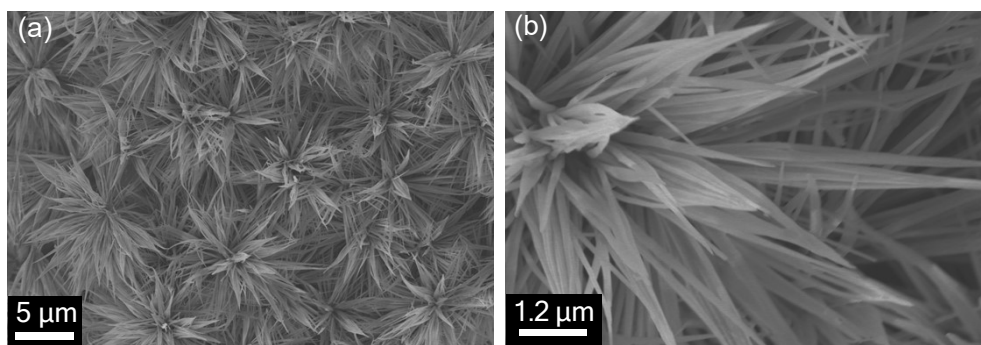


Figure S10. SEM images of CoP@Ni plate.

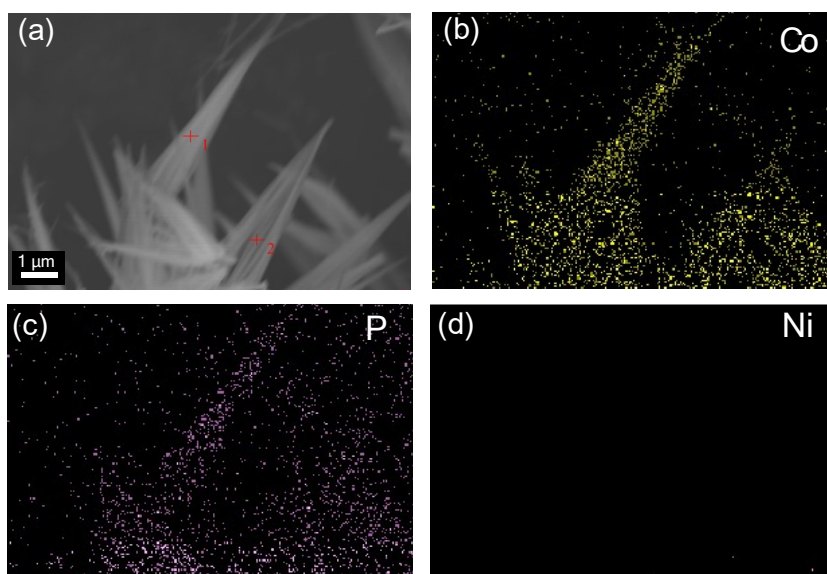


Figure S11. SEM image of CoP@Ni plate and corresponding EDS mapping images.

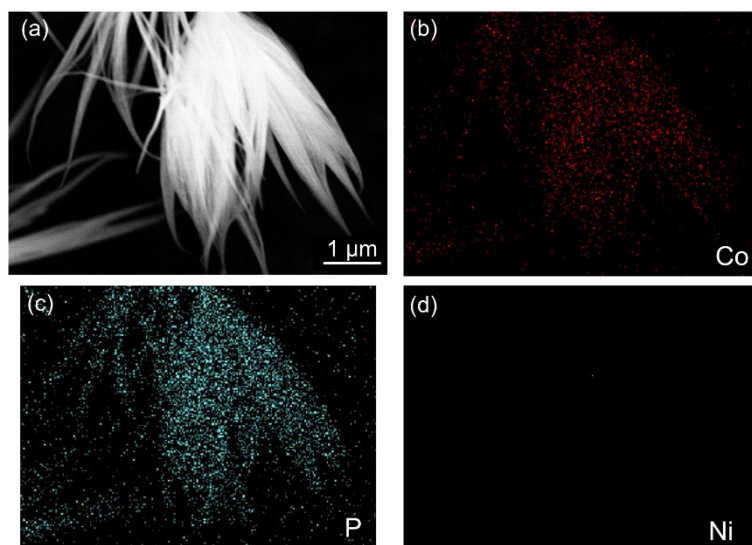


Figure S12. SEM image of CoP@NF and corresponding EDS mapping images.

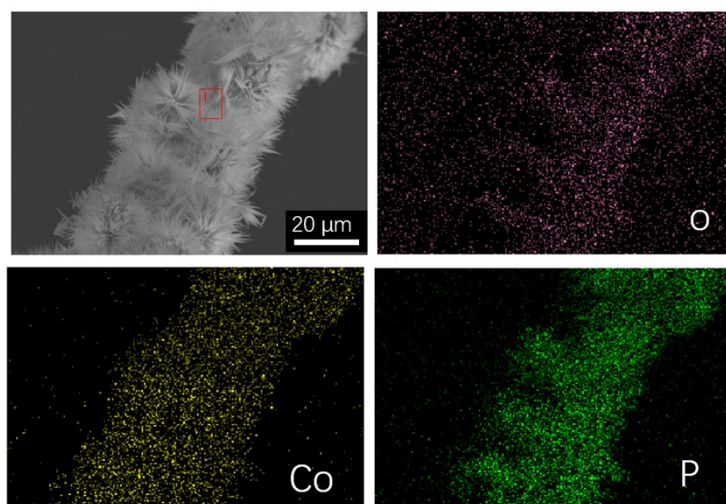


Figure S13. SEM image of CoP@carbon cloth and corresponding EDS mapping images.

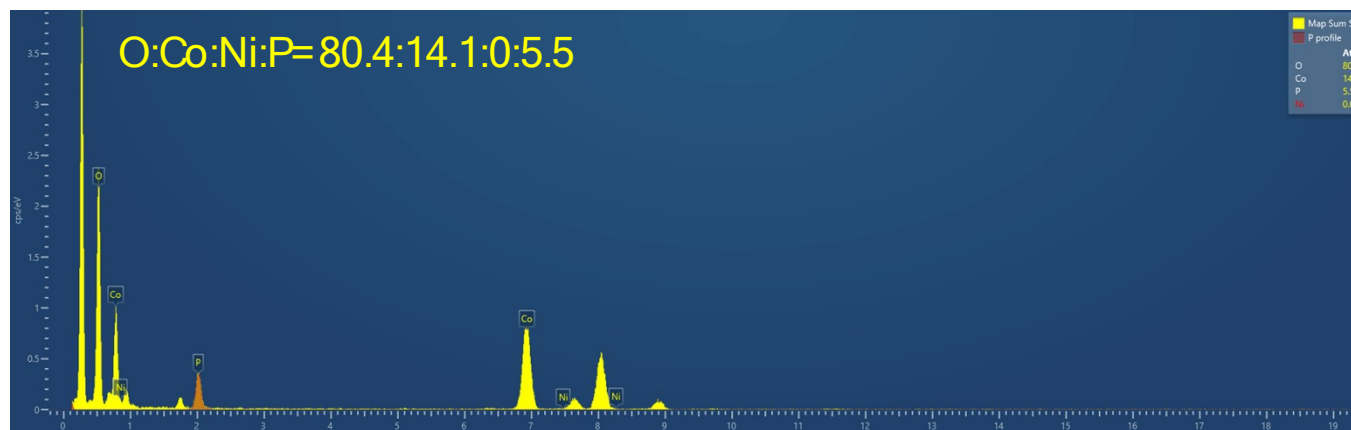
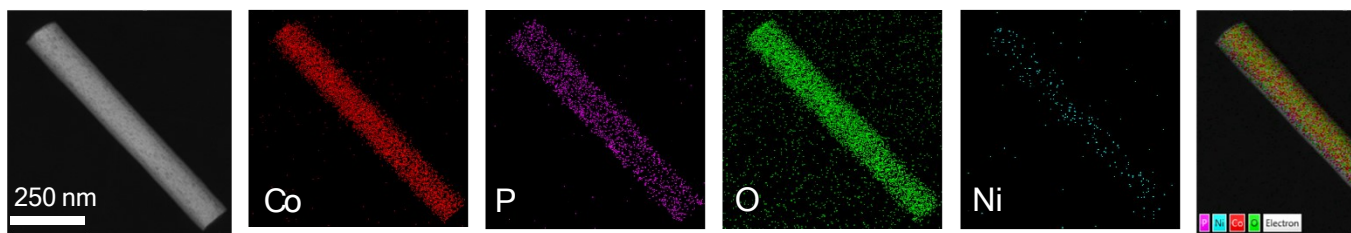


Figure S14. TEM image of CoP@Ni plate and its corresponding EDS mapping images of Co, Ni, P, O and their mixture and quantitative results.

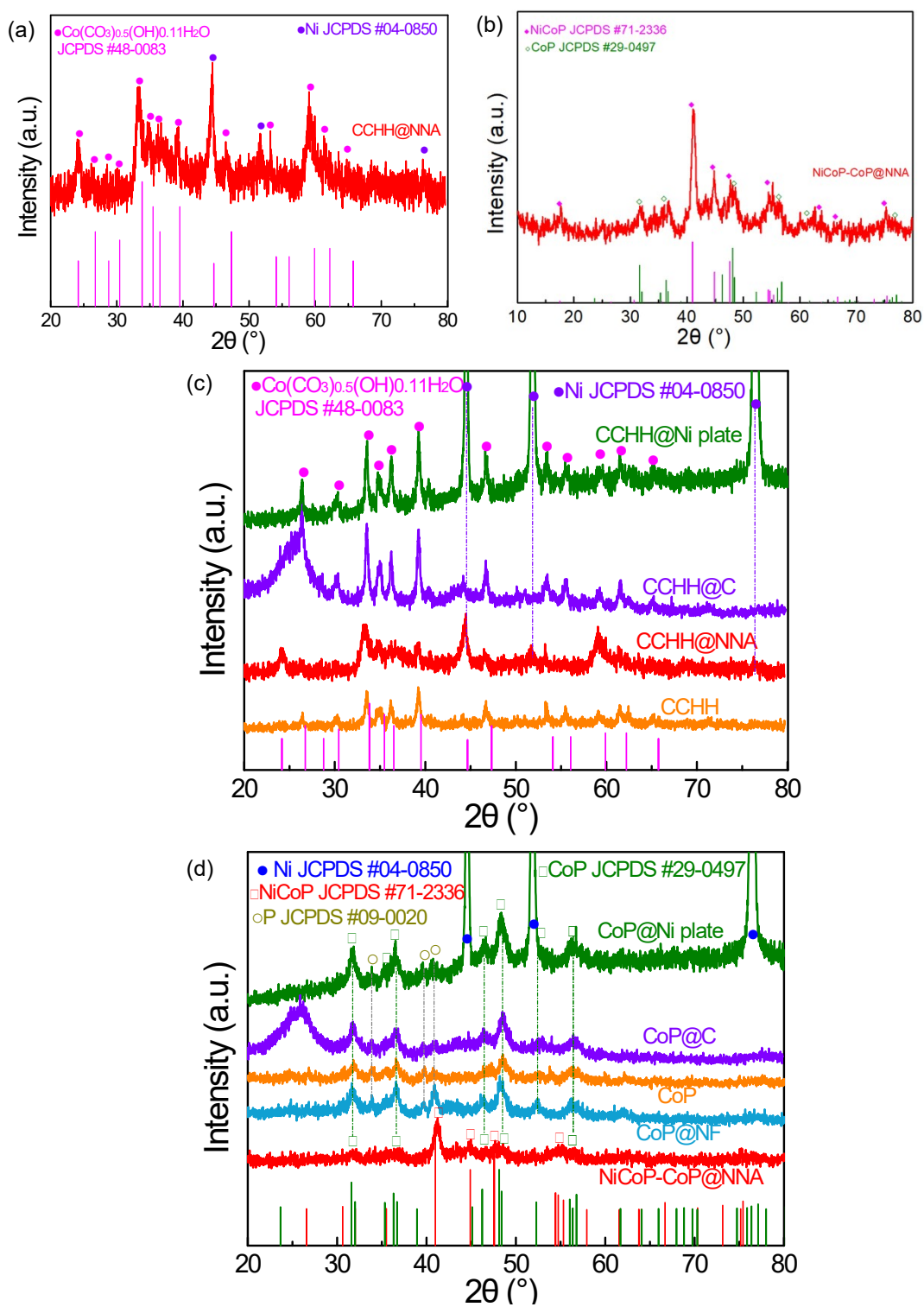


Figure S15. Enlarged and high-resolution XRD spectra of Figure 3a and 3b.

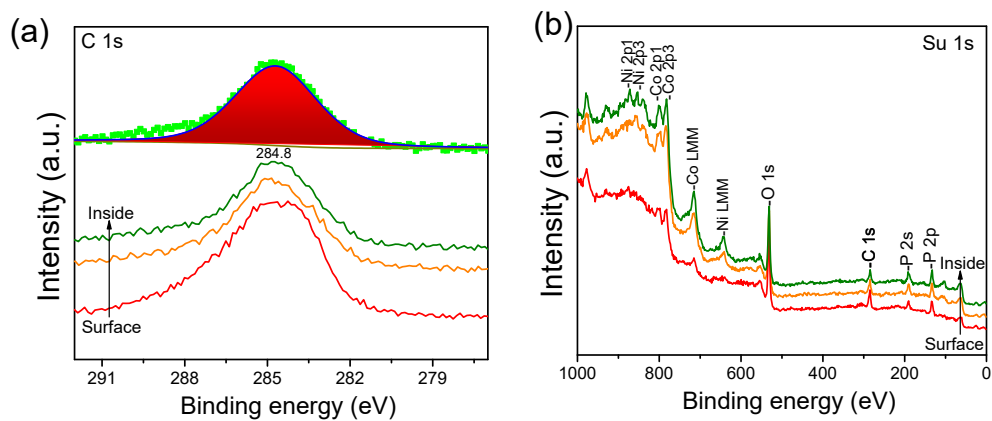


Figure S16. (a) High-resolution spectra of C1s and (b) full spectra from the XPS profile analysis of NiCoP-CoP@NNA.

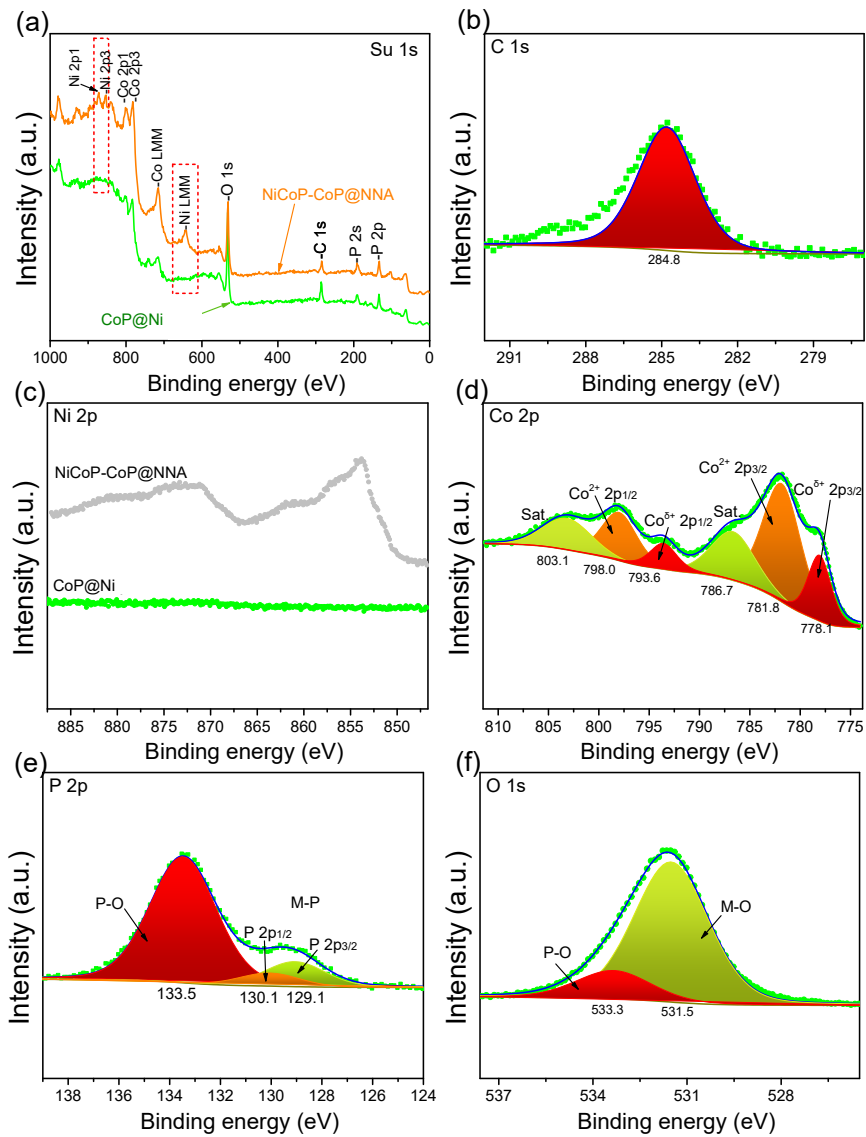


Figure S17. (a) full spectra and (b) high-resolution spectra of C 1s, Ni 2p, Co 2p, P 2p and O 1s of CoP@Ni plate.

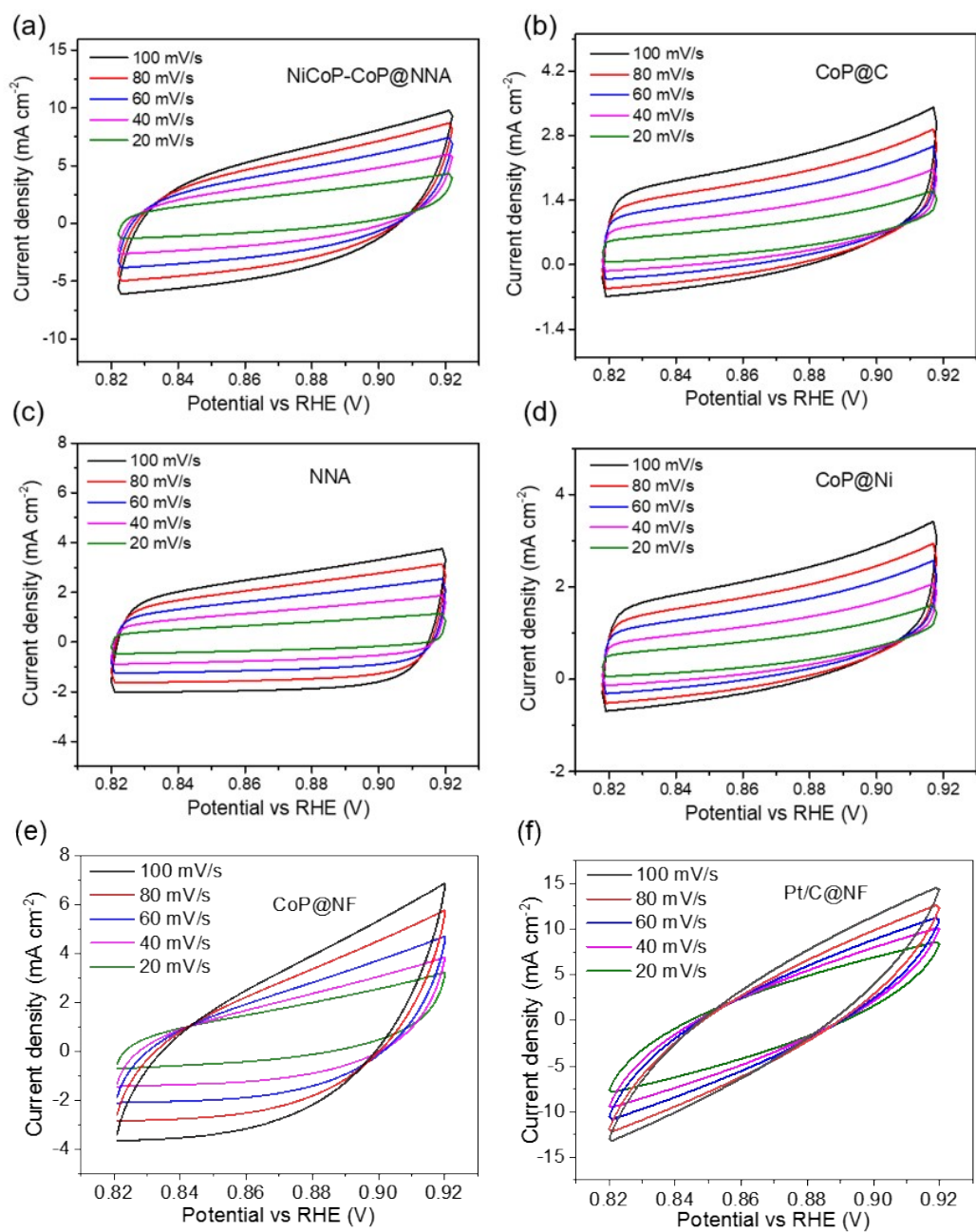


Figure S18. CV curves at different scan rates (20, 40, 60, 80, 100 mV/s) of (a) NiCoP-CoP@NNA, (b) CoP@C, (c) NNA, (d) CoP@Ni plate, (e) CoP@NF, and (f) Pt/C@NF.

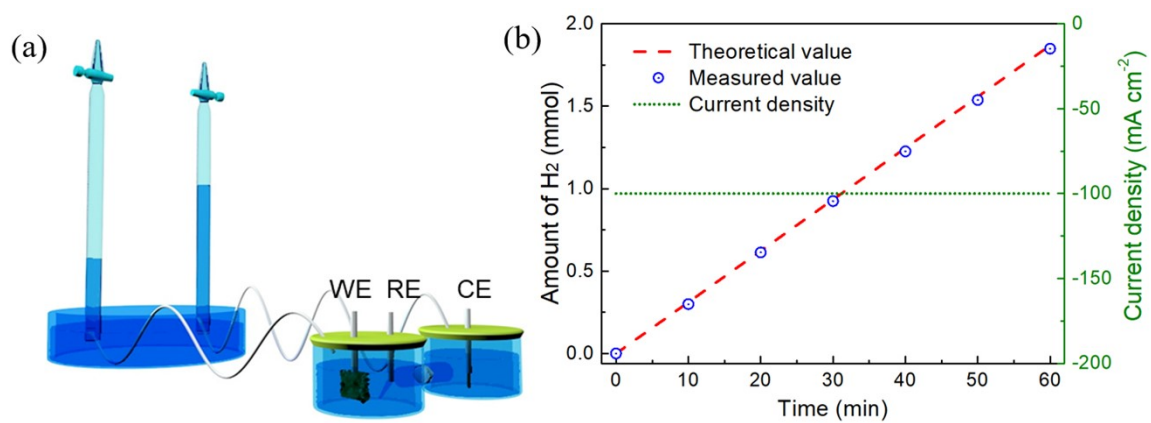


Figure S19. (a) Quantity of H₂ gas evolved as a function of time for NiCoP-CoP@NNA along with the expected amount at an overpotential of 80 mV in 1.0 M KOH. (b) The expected amount is calculated based on Faraday's law.

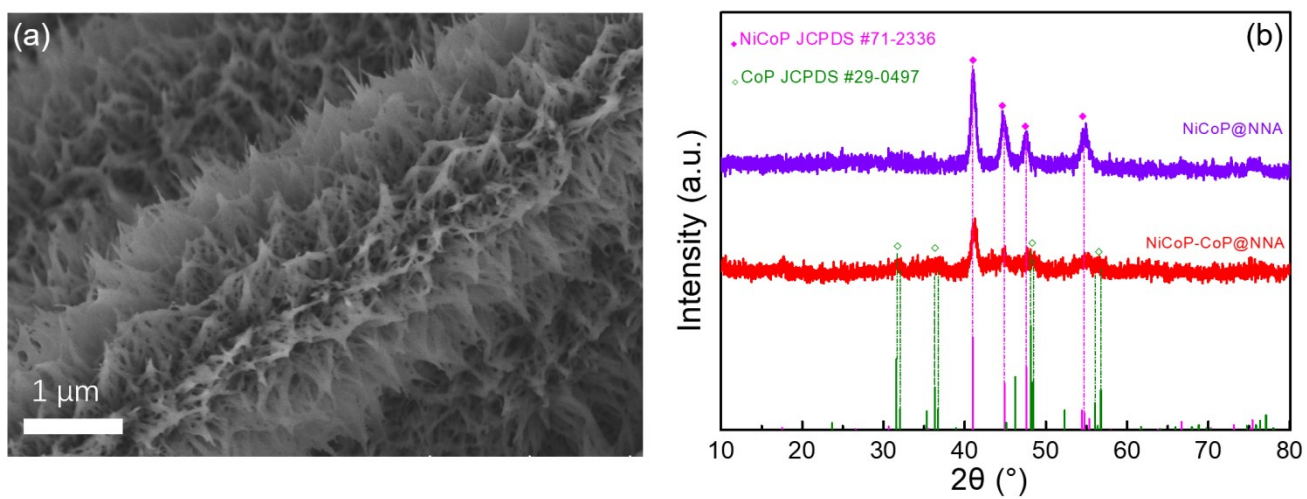


Figure S20. (a) SEM image of NiCoP@NNA. (b) XRD spectra of NiCoP@NNA and NiCoP-CoP@NNA.

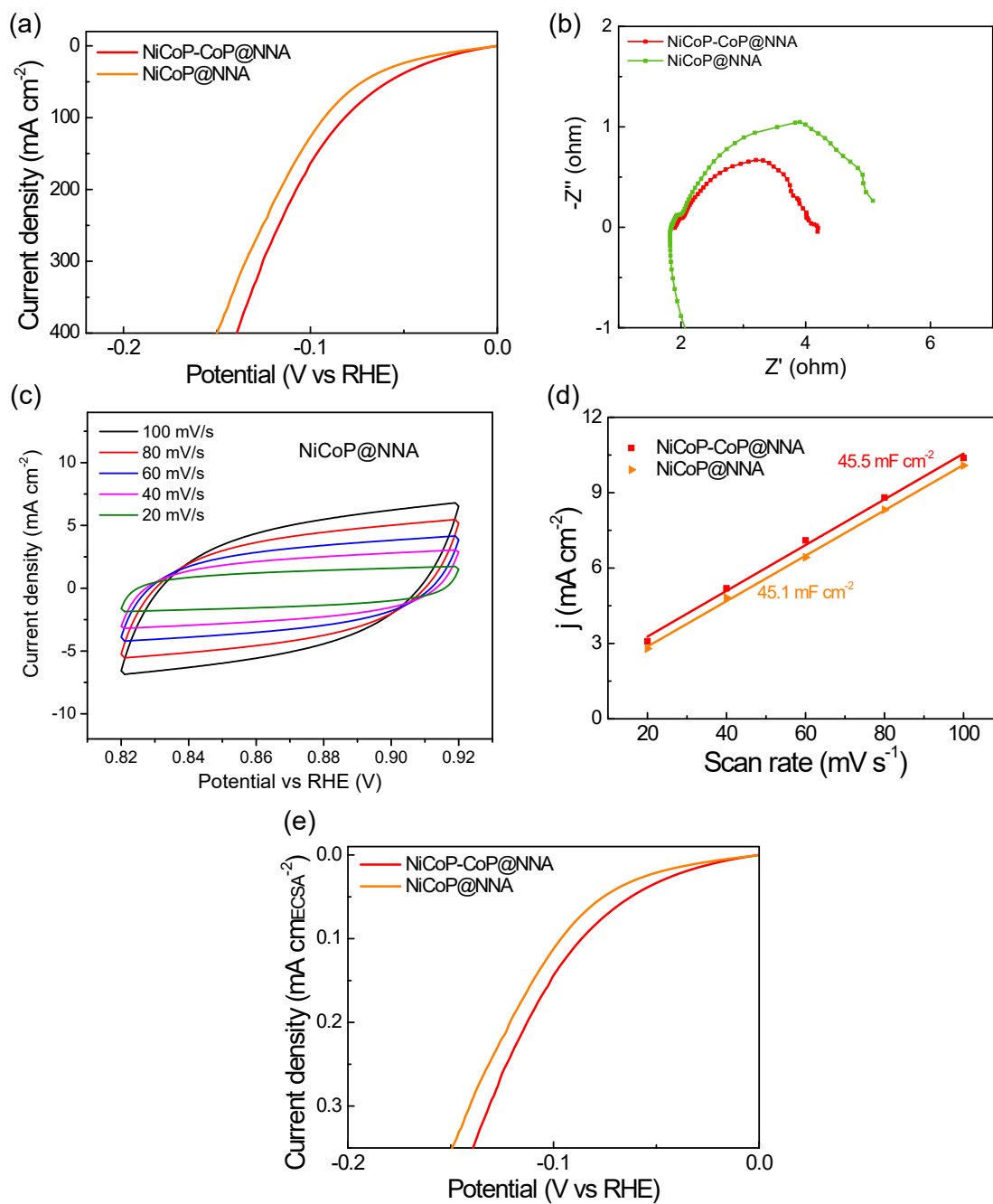


Figure S21. (a) HER polarization curves of NiCoP@NNA and NiCoP-CoP@NNA recorded in 1 M KOH (iR-corrected). The corresponding (b) EIS test at the HER overpotential of 100 mV. (c) Double-layer capacitance test and (d) calculation. (e) ECSA normalized HER polarization curves.

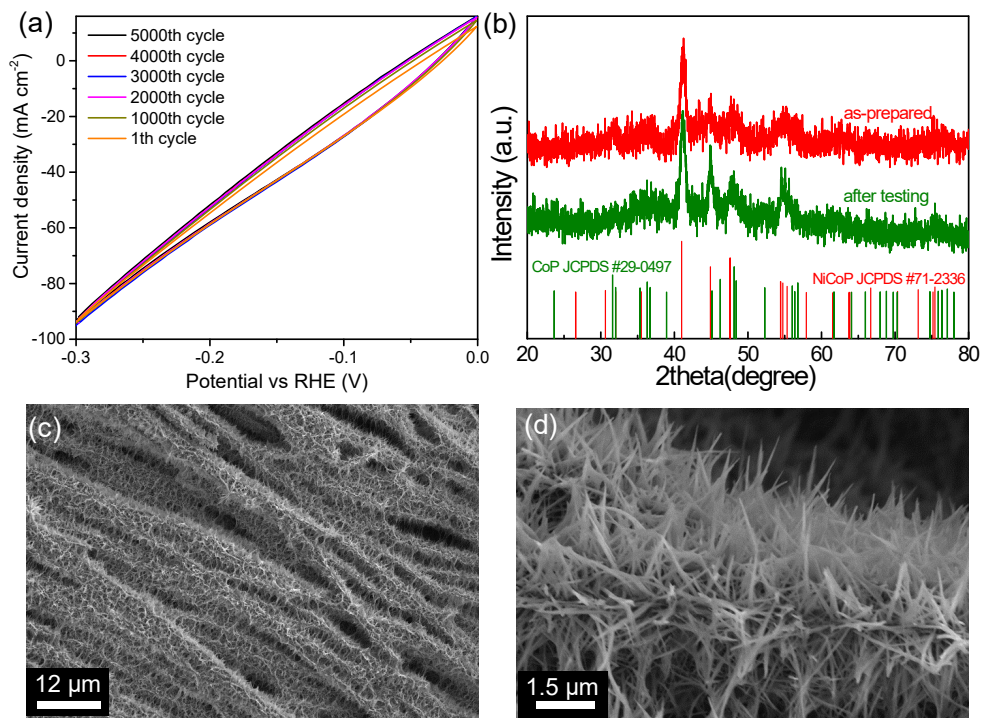


Figure S22. Stability characterization of NiCoP-CoP@NNA after 5000 CV cycles test. (a) CV curves at the scan rate of 100 mV/s, (b) XRD patterns comparisons, (c-d) SEM images after CV tests.

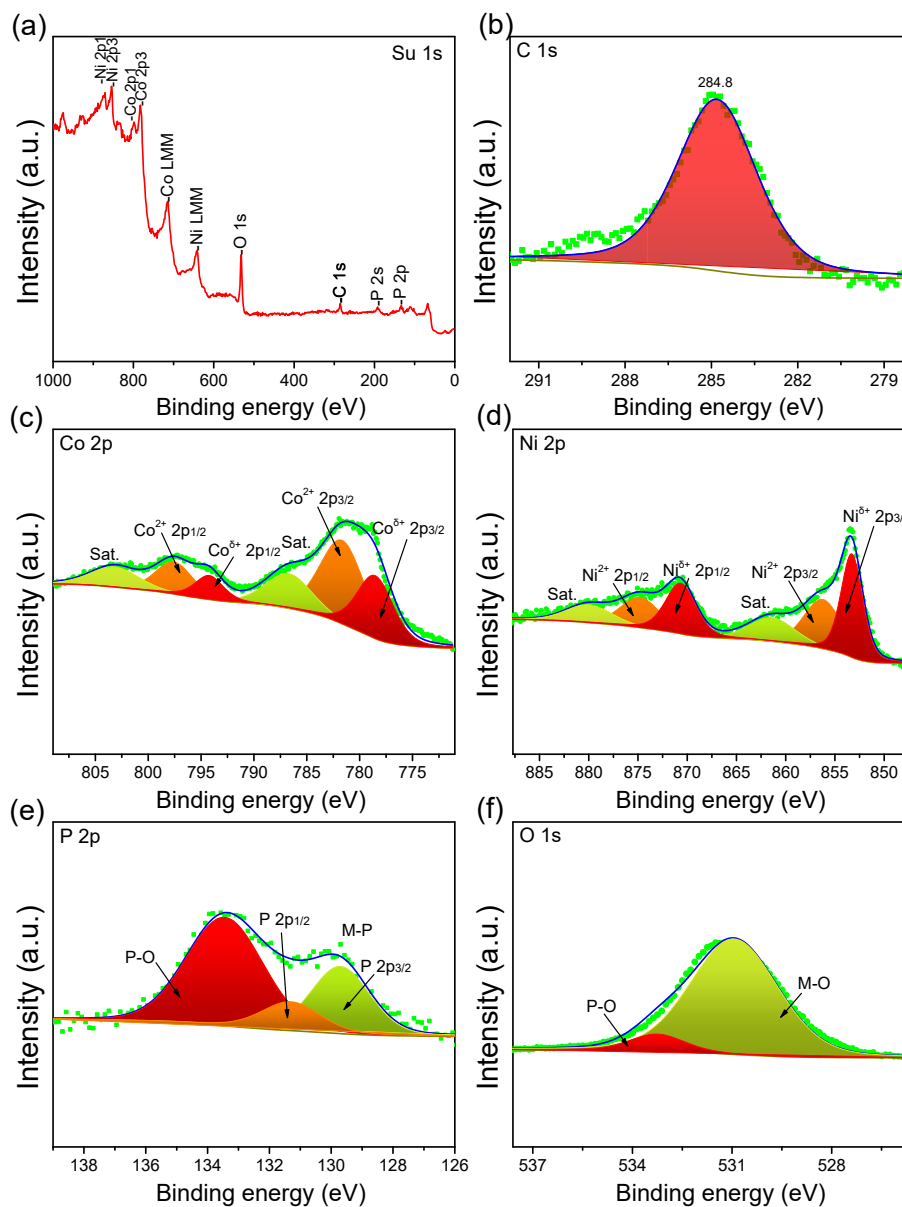


Figure S23. (a) full spectra and (b) high-resolution spectra of C 1s, Ni 2p, Co 2p, P 2p and O 1s of NiCoP-CoP@NNA after 5000 CV cycles test.

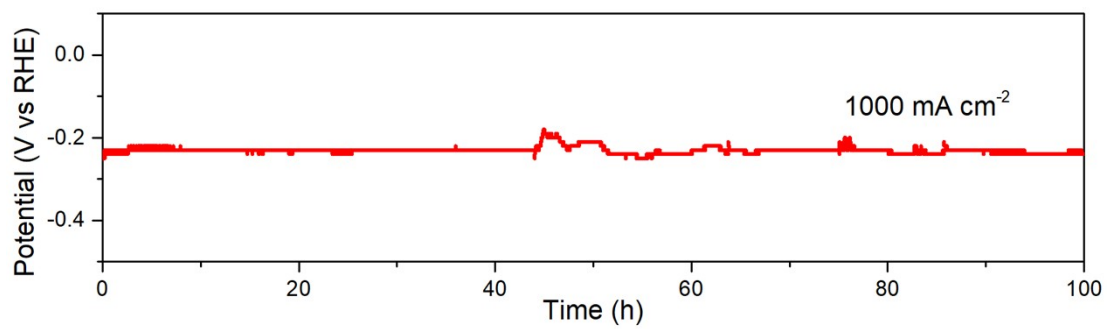


Figure S24. HER chronopotential test of NiCoP-CoP@NNA.

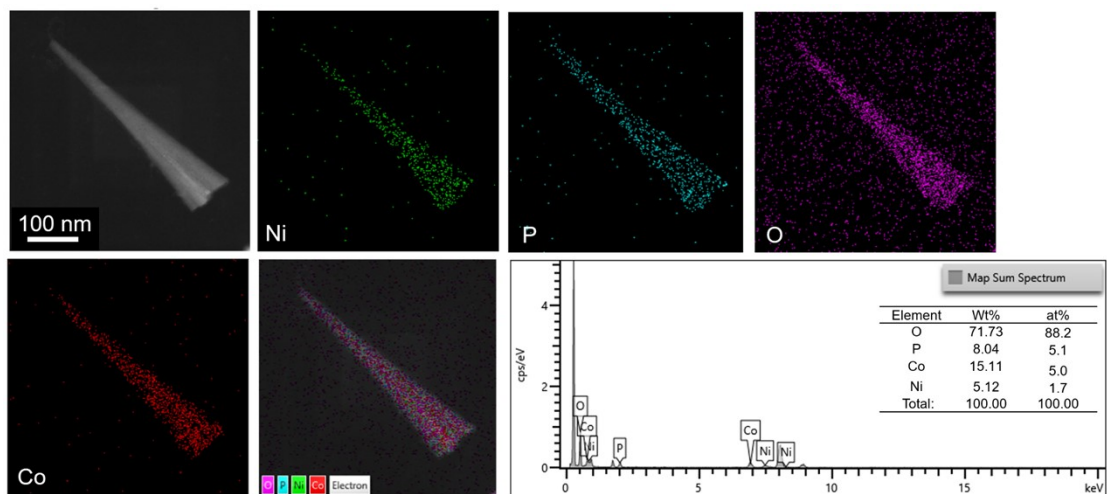


Figure S25. TEM image and corresponding EDS mapping images of NiCoP-CoP nano bristle obtained by 20-min annealing at 300 °C and the corresponding EDS quantitative analysis.

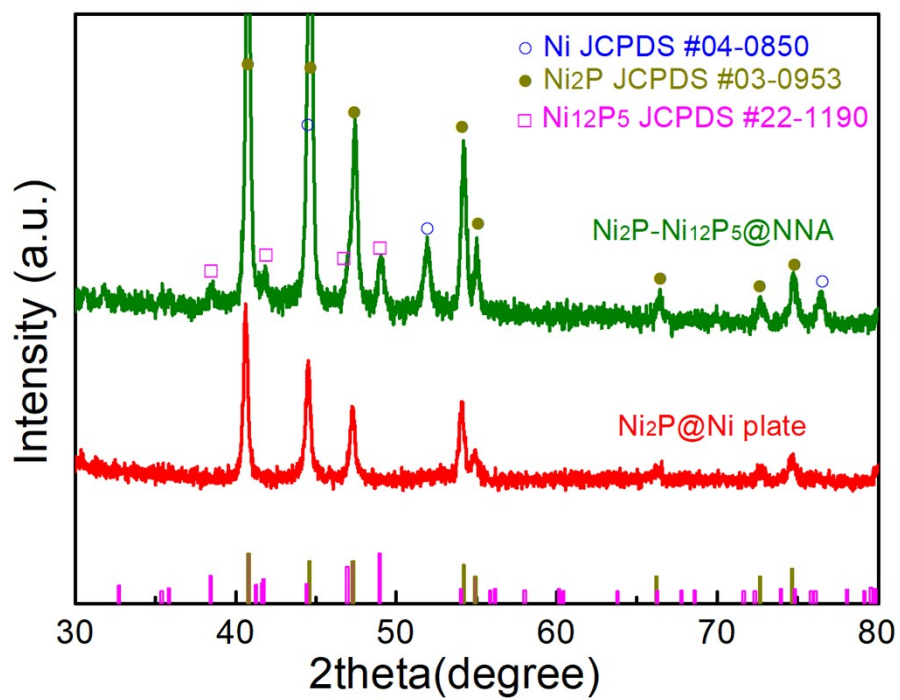


Figure S26. (b) XRD spectra of $\text{Ni}_2\text{P}@Ni$ plate (Ni_2P was peeled off from the substrate) and $\text{Ni}_2\text{P}-\text{Ni}_{12}\text{P}_5@NNA$.

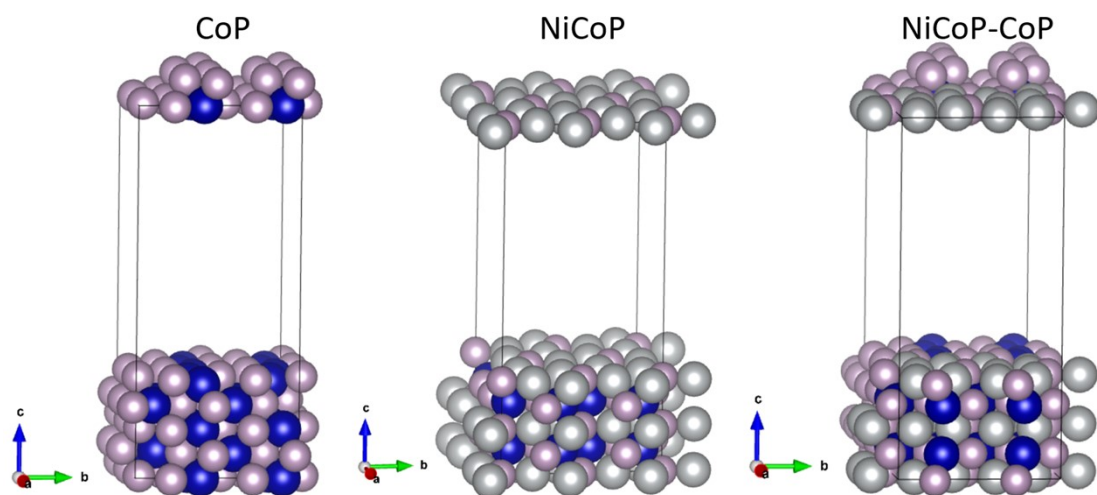


Figure S27. Atomic models of different catalysts used in the DFT calculations of water dissociation and hydrogen adsorption/desorption processes. (Grey: Ni; blue: Co; light pink: P; green: H; red: O).

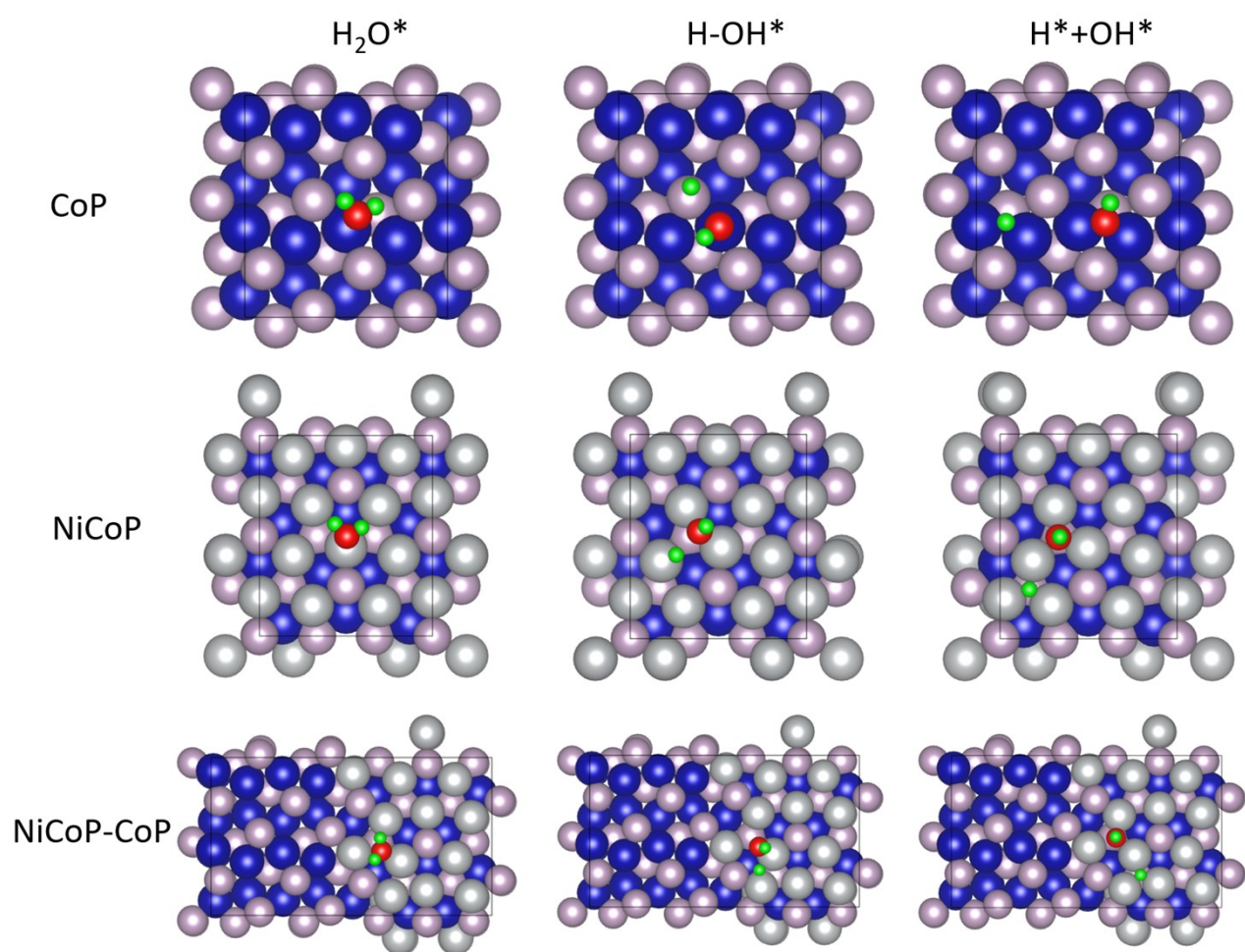


Figure S28. Reaction intermediates adsorption sites on different catalysts in the DFT calculations of water dissociation process. (Grey: Ni; blue: Co; light pink: P; green: H; red: O).

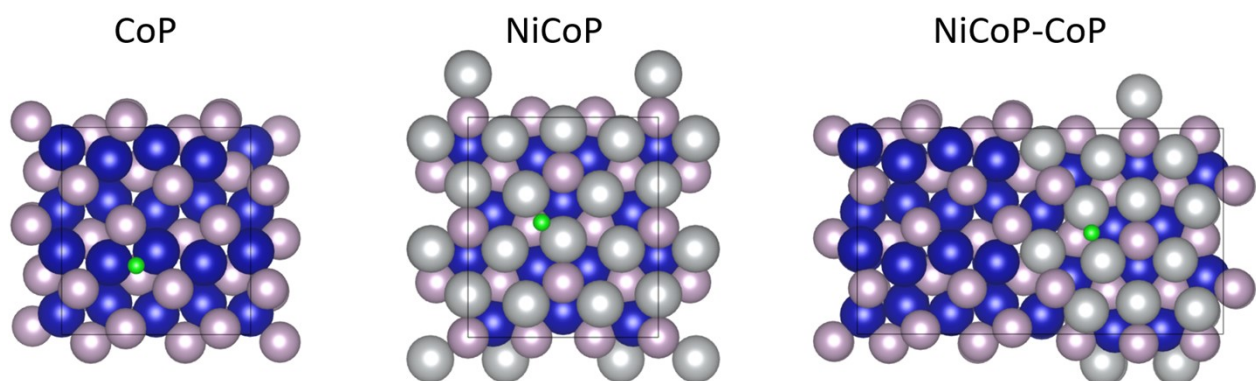


Figure S29. Reaction intermediates adsorption sites on different catalysts in the DFT calculations of hydrogen adsorption/desorption process. (Grey: Ni; blue: Co; light pink: P; green: H; red: O).

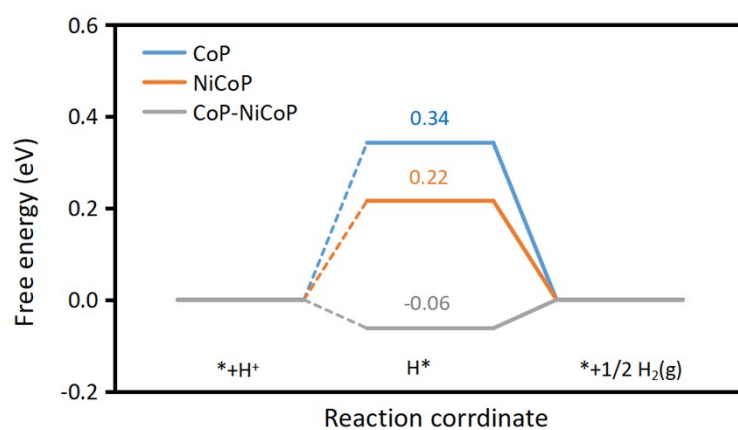


Figure S30. The Gibbs free energy diagrams for hydrogen adsorption/desorption process on CoP, NiCoP, and NiCoP-CoP interface.

Table S1. HER and OER electrocatalytic performance comparisons among recently reported advanced bifunctional alkaline water-splitting catalysts. η_{10} and η_{100} correspond to the overpotentials at the geometric current densities of 10, 100, and 200 mA cm⁻², respectively.

HER catalysts	HER η_{10} geometric (mV)	HER η_{100} geometric (mV)	HER Tafel (dec ⁻¹)	Electrolyte	Support	Mass loading (mg cm ⁻²)	Reference
NiCoP-CoP@NNA	20	80	28	1 M KOH	Ni foam	37	This work
S-CoP	24	114	58.4	1 M KOH	Ti mesh	1.8	Nano Energy, 2020, 78, 105347
C-Co ₂ P	30	65	36.9	1 M KOH	glassy carbon	2.18	Adv. Funct. Mater. 2021, 31, 2107333.
CePO ₄ /MoP/CC	48	~140	36	1 M KOH	carbon cloth	1.8	Small 2021, 17, 2102413.
MoO ₂ -MoP SE	61	~120	52.6	1 M KOH	Mo plate or Mo mesh	NA	J. Mater. Chem. A, 2022, DOI: 10.1039/D1TA10678C
Co-P@PC	76	180	49	1 M KOH	Carbon Paper	1	Small 2020, 16, 1900550
CoP/Mo ₂ CT _x	78	~300	66	1 M KOH	carbon cloth	0.4	J. Mater. Chem. A, 2021, 9, 21259-21269
MoP/MoO ₂	79	~110	41	1 M KOH	Carbon Paper	0.5	Chem. Eng. J., 430,2022, 132674
Ni ₁₂ P ₅ -Ni ₄ Nb ₅ P ₄ /PCC	81	188	76.4	1 M KOH	carbon cloth	3.95	Small 2020, 16, 2004843.
MoP/Mo ₂ N	89	190	78	1 M KOH	Ni foam	5	Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 6673
N, B-Ni ₂ P/G	92	210	57.7	1 M KOH	glassy carbon	3	Appl. Catal. B. 278 2020, 119284
MoP/NPG	126	>210	56	1 M KOH	glassy carbon	0.28	Appl. Catal. B. 260 2020, 118196
NiCoP/NPC	128	~350	70	1 M KOH	Ni foam	5	Appl. Catal. B. 283 (2021) 119635
Ni ₂ P-Fe ₂ P	128	225	86	1 M KOH	Ni foam	15.0	Adv. Funct. Mater. 2021, 31, 2006484.
CoMn-P@NG	160	NA	110.7	1 M KOH	glassy carbon	2.15	Chem. Commun., 2021, 57, 2400-2403

Part of the data shown in the table was measured from the graph in the references and marked by the symbol “~”.

Appendix

Water dissociation process

CoP H₂O*

Title CoP(2\0\0)

Lattice type P

Space group name P 1

Space group number 1

Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
10.05150	11.00530	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 2765.494303 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1 Co	Co1	0.24946	0.34874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
2 Co	Co2	0.24946	0.84874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
3 Co	Co3	0.49946	0.40126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
4 Co	Co4	0.49946	0.90126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
5 Co	Co5	0.74946	0.34874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
6 Co	Co6	0.74946	0.84874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
7 Co	Co7	0.99946	0.40126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
8 Co	Co8	0.99946	0.90126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
9 Co	Co9	0.00054	0.09874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10 Co	Co10	0.00054	0.59874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11 Co	Co11	0.25054	0.15126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12 Co	Co12	0.25054	0.65126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13 Co	Co13	0.50054	0.09874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
14 Co	Co14	0.50054	0.59874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
15 Co	Co15	0.75054	0.15126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
16 Co	Co16	0.75054	0.65126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
17 Co	Co17	0.24946	0.34874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
18 Co	Co18	0.24946	0.84874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
19 Co	Co19	0.49946	0.40126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
20 Co	Co20	0.49946	0.90126	0.13125	1.000	1.000	1a	1

21 Co	Co21	0.74946	0.34874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
22 Co	Co22	0.74946	0.84874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
23 Co	Co23	0.99946	0.40126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
24 Co	Co24	0.99946	0.90126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
25 Co	Co25	0.99782	0.10244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
26 Co	Co26	0.99782	0.60244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
27 Co	Co27	0.24781	0.14756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
28 Co	Co28	0.24781	0.64756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
29 Co	Co29	0.49782	0.10244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
30 Co	Co30	0.49782	0.60244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
31 Co	Co31	0.74782	0.14756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
32 Co	Co32	0.74782	0.64756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
33 Co	Co33	0.25209	0.34756	0.25116	1.000	1.000	1a	1
34 Co	Co34	0.25209	0.84756	0.25116	1.000	1.000	1a	1
35 Co	Co35	0.50209	0.40244	0.25116	1.000	1.000	1a	1
36 Co	Co36	0.50209	0.90244	0.25116	1.000	1.000	1a	1
37 Co	Co37	0.75209	0.34756	0.25116	1.000	1.000	1a	1
38 Co	Co38	0.75209	0.84756	0.25116	1.000	1.000	1a	1
39 Co	Co39	0.00209	0.40244	0.25116	1.000	1.000	1a	1
40 Co	Co40	0.00209	0.90244	0.25116	1.000	1.000	1a	1
41 P	P1	0.09583	0.20919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
42 P	P2	0.09583	0.70919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
43 P	P3	0.34583	0.04081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
44 P	P4	0.34583	0.54081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
45 P	P5	0.59583	0.20919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
46 P	P6	0.59583	0.70919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
47 P	P7	0.84583	0.04081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
48 P	P8	0.84583	0.54081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
49 P	P9	0.15417	0.45919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
50 P	P10	0.15417	0.95919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
51 P	P11	0.40417	0.29081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
52 P	P12	0.40417	0.79081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
53 P	P13	0.65417	0.45919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
54 P	P14	0.65417	0.95919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
55 P	P15	0.90417	0.29081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
56 P	P16	0.90417	0.79081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
57 P	P17	0.09583	0.20919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
58 P	P18	0.09583	0.70919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
59 P	P19	0.34583	0.04081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
60 P	P20	0.34583	0.54081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
61 P	P21	0.59583	0.20919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
62 P	P22	0.59583	0.70919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
63 P	P23	0.84583	0.04081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
64 P	P24	0.84583	0.54081	0.13125	1.000	1.000	1a	1

65 P	P25	0.15513	0.46395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
66 P	P26	0.15513	0.96395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
67 P	P27	0.40513	0.28605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
68 P	P28	0.40513	0.78605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
69 P	P29	0.65513	0.46395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
70 P	P30	0.65513	0.96395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
71 P	P31	0.90513	0.28605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
72 P	P32	0.90513	0.78605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
73 P	P33	0.08905	0.22099	0.26578	1.000	1.000	1a	1
74 P	P34	0.08905	0.72099	0.26578	1.000	1.000	1a	1
75 P	P35	0.33904	0.02901	0.26578	1.000	1.000	1a	1
76 P	P36	0.33904	0.52901	0.26578	1.000	1.000	1a	1
77 P	P37	0.58904	0.22099	0.26578	1.000	1.000	1a	1
78 P	P38	0.58904	0.72099	0.26578	1.000	1.000	1a	1
79 P	P39	0.83904	0.02901	0.26578	1.000	1.000	1a	1
80 P	P40	0.83904	0.52901	0.26578	1.000	1.000	1a	1
81 O	O1	0.55677	0.45939	0.34259	1.000	1.000	1a	1
82 H	H1	0.64284	0.50024	0.33790	1.000	1.000	1a	1
83 H	H2	0.49502	0.52433	0.35275	1.000	1.000	1a	1

=====
 ===

NiCoP-CoP H₂O*

=====
 ===

Title opt-Test

Lattice type P

Space group name P 1

Space group number 1

Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
20.00560	11.24700	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 5625.074443 Å³

Structure parameters

x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
---	---	---	------	---	------	------

1 Co	Co1	0.00675	0.40905	0.00000	1.000	1.000	1a	1
2 Co	Co2	0.00675	0.90905	0.00000	1.000	1.000	1a	1
3 Co	Co3	0.12814	0.34862	0.00000	1.000	1.000	1a	1
4 Co	Co4	0.12814	0.84862	0.00000	1.000	1.000	1a	1
5 Co	Co5	0.25523	0.39733	0.00000	1.000	1.000	1a	1
6 Co	Co6	0.25523	0.89733	0.00000	1.000	1.000	1a	1
7 Co	Co7	0.38277	0.35161	0.00000	1.000	1.000	1a	1
8 Co	Co8	0.38277	0.85161	0.00000	1.000	1.000	1a	1
9 Co	Co9	0.01686	0.09208	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10 Co	Co10	0.01686	0.59208	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11 Co	Co11	0.13517	0.14703	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12 Co	Co12	0.13517	0.64703	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13 Co	Co13	0.25705	0.10125	0.06562	1.000	1.000	1a	1
14 Co	Co14	0.25705	0.60125	0.06562	1.000	1.000	1a	1
15 Co	Co15	0.37959	0.14467	0.06562	1.000	1.000	1a	1
16 Co	Co16	0.37959	0.64467	0.06562	1.000	1.000	1a	1
17 Co	Co17	0.50387	0.08464	0.06562	1.000	1.000	1a	1
18 Co	Co18	0.50387	0.58464	0.06562	1.000	1.000	1a	1
19 Co	Co19	0.58720	0.27888	0.06562	1.000	1.000	1a	1
20 Co	Co20	0.58720	0.77888	0.06562	1.000	1.000	1a	1
21 Co	Co21	0.70394	0.02381	0.06562	1.000	1.000	1a	1
22 Co	Co22	0.70394	0.52381	0.06562	1.000	1.000	1a	1
23 Co	Co23	0.77258	0.32820	0.06562	1.000	1.000	1a	1
24 Co	Co24	0.77258	0.82820	0.06562	1.000	1.000	1a	1
25 Co	Co25	0.83653	0.02678	0.06562	1.000	1.000	1a	1
26 Co	Co26	0.83653	0.52678	0.06562	1.000	1.000	1a	1
27 Co	Co27	0.95638	0.27536	0.06562	1.000	1.000	1a	1
28 Co	Co28	0.95638	0.77536	0.06562	1.000	1.000	1a	1
29 Co	Co29	0.01381	0.40341	0.13125	1.000	1.000	1a	1
30 Co	Co30	0.01381	0.90341	0.13125	1.000	1.000	1a	1
31 Co	Co31	0.13239	0.34729	0.13125	1.000	1.000	1a	1
32 Co	Co32	0.13239	0.84729	0.13125	1.000	1.000	1a	1
33 Co	Co33	0.25310	0.39909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
34 Co	Co34	0.25310	0.89909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
35 Co	Co35	0.37623	0.35070	0.13125	1.000	1.000	1a	1
36 Co	Co36	0.37623	0.85070	0.13125	1.000	1.000	1a	1
37 Co	Co37	0.01475	0.09492	0.19657	1.000	1.000	1a	1
38 Co	Co38	0.01514	0.59573	0.19689	1.000	1.000	1a	1
39 Co	Co39	0.13303	0.14032	0.19691	1.000	1.000	1a	1
40 Co	Co40	0.13328	0.64000	0.19688	1.000	1.000	1a	1
41 Co	Co41	0.25541	0.10321	0.19853	1.000	1.000	1a	1
42 Co	Co42	0.25551	0.60234	0.19849	1.000	1.000	1a	1
43 Co	Co43	0.37816	0.14697	0.19770	1.000	1.000	1a	1
44 Co	Co44	0.37791	0.64497	0.19815	1.000	1.000	1a	1

45 Co	Co45	0.50360	0.09406	0.20043	1.000	1.000	1a	1
46 Co	Co46	0.50329	0.59198	0.20045	1.000	1.000	1a	1
47 Co	Co47	0.58639	0.27477	0.19938	1.000	1.000	1a	1
48 Co	Co48	0.58456	0.77349	0.20161	1.000	1.000	1a	1
49 Co	Co49	0.70305	0.02152	0.19767	1.000	1.000	1a	1
50 Co	Co50	0.70158	0.51720	0.20063	1.000	1.000	1a	1
51 Co	Co51	0.77140	0.32938	0.19819	1.000	1.000	1a	1
52 Co	Co52	0.76994	0.82815	0.19855	1.000	1.000	1a	1
53 Co	Co53	0.83266	0.02809	0.20171	1.000	1.000	1a	1
54 Co	Co54	0.83365	0.52648	0.19967	1.000	1.000	1a	1
55 Co	Co55	0.95566	0.28059	0.19777	1.000	1.000	1a	1
56 Co	Co56	0.95475	0.78094	0.19808	1.000	1.000	1a	1
57 Co	Co57	0.00803	0.41578	0.26113	1.000	1.000	1a	1
58 Co	Co58	0.00803	0.91652	0.26109	1.000	1.000	1a	1
59 Co	Co59	0.12767	0.33996	0.25408	1.000	1.000	1a	1
60 Co	Co60	0.12767	0.83971	0.25370	1.000	1.000	1a	1
61 Co	Co61	0.25511	0.39846	0.25073	1.000	1.000	1a	1
62 Co	Co62	0.25484	0.89846	0.25025	1.000	1.000	1a	1
63 Co	Co63	0.38222	0.35132	0.25385	1.000	1.000	1a	1
64 Co	Co64	0.38080	0.85125	0.25338	1.000	1.000	1a	1
65 Ni	Ni1	0.51052	0.40283	0.00000	1.000	1.000	1a	1
66 Ni	Ni2	0.51052	0.90283	0.00000	1.000	1.000	1a	1
67 Ni	Ni3	0.62146	0.10806	0.00000	1.000	1.000	1a	1
68 Ni	Ni4	0.62146	0.60806	0.00000	1.000	1.000	1a	1
69 Ni	Ni5	0.67694	0.35784	0.00000	1.000	1.000	1a	1
70 Ni	Ni6	0.67694	0.85784	0.00000	1.000	1.000	1a	1
71 Ni	Ni7	0.76923	0.15455	0.00000	1.000	1.000	1a	1
72 Ni	Ni8	0.76923	0.65455	0.00000	1.000	1.000	1a	1
73 Ni	Ni9	0.86953	0.35916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
74 Ni	Ni10	0.86953	0.85916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
75 Ni	Ni11	0.93046	0.11273	0.00000	1.000	1.000	1a	1
76 Ni	Ni12	0.93046	0.61273	0.00000	1.000	1.000	1a	1
77 Ni	Ni13	0.50670	0.39909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
78 Ni	Ni14	0.50670	0.89909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
79 Ni	Ni15	0.62370	0.10922	0.13125	1.000	1.000	1a	1
80 Ni	Ni16	0.62370	0.60922	0.13125	1.000	1.000	1a	1
81 Ni	Ni17	0.67014	0.36192	0.13125	1.000	1.000	1a	1
82 Ni	Ni18	0.67014	0.86192	0.13125	1.000	1.000	1a	1
83 Ni	Ni19	0.77115	0.15432	0.13125	1.000	1.000	1a	1
84 Ni	Ni20	0.77115	0.65432	0.13125	1.000	1.000	1a	1
85 Ni	Ni21	0.87340	0.36151	0.13125	1.000	1.000	1a	1
86 Ni	Ni22	0.87340	0.86151	0.13125	1.000	1.000	1a	1
87 Ni	Ni23	0.91952	0.11549	0.13125	1.000	1.000	1a	1
88 Ni	Ni24	0.91952	0.61549	0.13125	1.000	1.000	1a	1

89 Ni	Ni25	0.51086	0.39603	0.25653	1.000	1.000	1a	1
90 Ni	Ni26	0.50571	0.89958	0.25211	1.000	1.000	1a	1
91 Ni	Ni27	0.64159	0.12360	0.27156	1.000	1.000	1a	1
92 Ni	Ni28	0.62123	0.60790	0.26657	1.000	1.000	1a	1
93 Ni	Ni29	0.67856	0.34496	0.27012	1.000	1.000	1a	1
94 Ni	Ni30	0.67183	0.86517	0.26239	1.000	1.000	1a	1
95 Ni	Ni31	0.76767	0.15972	0.26635	1.000	1.000	1a	1
96 Ni	Ni32	0.77026	0.65417	0.26302	1.000	1.000	1a	1
97 Ni	Ni33	0.87002	0.36418	0.26202	1.000	1.000	1a	1
98 Ni	Ni34	0.86742	0.86145	0.26264	1.000	1.000	1a	1
99 Ni	Ni35	0.92732	0.12267	0.26347	1.000	1.000	1a	1
100 Ni	Ni36	0.92636	0.62161	0.26323	1.000	1.000	1a	1
101 P	P1	0.03409	0.21848	0.00000	1.000	1.000	1a	1
102 P	P2	0.03409	0.71848	0.00000	1.000	1.000	1a	1
103 P	P3	0.17390	0.02890	0.00000	1.000	1.000	1a	1
104 P	P4	0.17390	0.52890	0.00000	1.000	1.000	1a	1
105 P	P5	0.29813	0.21916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
106 P	P6	0.29813	0.71916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
107 P	P7	0.42362	0.03145	0.00000	1.000	1.000	1a	1
108 P	P8	0.42362	0.53145	0.00000	1.000	1.000	1a	1
109 P	P9	0.52912	0.20886	0.00000	1.000	1.000	1a	1
110 P	P10	0.52912	0.70886	0.00000	1.000	1.000	1a	1
111 P	P11	0.77143	0.45725	0.00000	1.000	1.000	1a	1
112 P	P12	0.77143	0.95725	0.00000	1.000	1.000	1a	1
113 P	P13	0.08693	0.45321	0.06562	1.000	1.000	1a	1
114 P	P14	0.08693	0.95321	0.06562	1.000	1.000	1a	1
115 P	P15	0.20538	0.29402	0.06562	1.000	1.000	1a	1
116 P	P16	0.20538	0.79402	0.06562	1.000	1.000	1a	1
117 P	P17	0.32908	0.45438	0.06562	1.000	1.000	1a	1
118 P	P18	0.32908	0.95438	0.06562	1.000	1.000	1a	1
119 P	P19	0.44768	0.29725	0.06562	1.000	1.000	1a	1
120 P	P20	0.44768	0.79725	0.06562	1.000	1.000	1a	1
121 P	P21	0.59766	0.46715	0.06562	1.000	1.000	1a	1
122 P	P22	0.59766	0.96715	0.06562	1.000	1.000	1a	1
123 P	P23	0.68981	0.21162	0.06562	1.000	1.000	1a	1
124 P	P24	0.68981	0.71162	0.06562	1.000	1.000	1a	1
125 P	P25	0.85529	0.21141	0.06562	1.000	1.000	1a	1
126 P	P26	0.85529	0.71141	0.06562	1.000	1.000	1a	1
127 P	P27	0.93738	0.46256	0.06562	1.000	1.000	1a	1
128 P	P28	0.93738	0.96256	0.06562	1.000	1.000	1a	1
129 P	P29	0.03746	0.21394	0.13125	1.000	1.000	1a	1
130 P	P30	0.03746	0.71394	0.13125	1.000	1.000	1a	1
131 P	P31	0.17801	0.04371	0.13125	1.000	1.000	1a	1
132 P	P32	0.17801	0.54371	0.13125	1.000	1.000	1a	1

133 P	P33	0.30152	0.20524	0.13125	1.000	1.000	1a	1
134 P	P34	0.30152	0.70524	0.13125	1.000	1.000	1a	1
135 P	P35	0.42559	0.04086	0.13125	1.000	1.000	1a	1
136 P	P36	0.42559	0.54086	0.13125	1.000	1.000	1a	1
137 P	P37	0.53204	0.20422	0.13125	1.000	1.000	1a	1
138 P	P38	0.53204	0.70422	0.13125	1.000	1.000	1a	1
139 P	P39	0.77155	0.45710	0.13125	1.000	1.000	1a	1
140 P	P40	0.77155	0.95710	0.13125	1.000	1.000	1a	1
141 P	P41	0.08574	0.45725	0.19774	1.000	1.000	1a	1
142 P	P42	0.08556	0.95732	0.19764	1.000	1.000	1a	1
143 P	P43	0.20531	0.28366	0.19700	1.000	1.000	1a	1
144 P	P44	0.20548	0.78310	0.19671	1.000	1.000	1a	1
145 P	P45	0.33200	0.46270	0.19811	1.000	1.000	1a	1
146 P	P46	0.33214	0.96439	0.19801	1.000	1.000	1a	1
147 P	P47	0.45517	0.28460	0.20036	1.000	1.000	1a	1
148 P	P48	0.45255	0.78382	0.19816	1.000	1.000	1a	1
149 P	P49	0.59626	0.46662	0.19929	1.000	1.000	1a	1
150 P	P50	0.59772	0.97226	0.21105	1.000	1.000	1a	1
151 P	P51	0.68950	0.21040	0.19814	1.000	1.000	1a	1
152 P	P52	0.68736	0.70783	0.20502	1.000	1.000	1a	1
153 P	P53	0.85548	0.21216	0.20333	1.000	1.000	1a	1
154 P	P54	0.85475	0.71202	0.20276	1.000	1.000	1a	1
155 P	P55	0.93458	0.46766	0.20055	1.000	1.000	1a	1
156 P	P56	0.93356	0.96759	0.20127	1.000	1.000	1a	1
157 P	P57	0.02968	0.22415	0.26238	1.000	1.000	1a	1
158 P	P58	0.02856	0.72477	0.26259	1.000	1.000	1a	1
159 P	P59	0.17238	0.02151	0.26331	1.000	1.000	1a	1
160 P	P60	0.17263	0.52208	0.26354	1.000	1.000	1a	1
161 P	P61	0.30009	0.22261	0.26529	1.000	1.000	1a	1
162 P	P62	0.29916	0.72234	0.26519	1.000	1.000	1a	1
163 P	P63	0.42398	0.03235	0.26699	1.000	1.000	1a	1
164 P	P64	0.42642	0.53097	0.26734	1.000	1.000	1a	1
165 P	P65	0.54220	0.20358	0.27514	1.000	1.000	1a	1
166 P	P66	0.53140	0.71112	0.27670	1.000	1.000	1a	1
167 P	P67	0.77137	0.45604	0.26878	1.000	1.000	1a	1
168 P	P68	0.76909	0.95982	0.26937	1.000	1.000	1a	1
169 O	O1	0.60738	0.40822	0.33687	1.000	1.000	1a	1
170 H	H1	0.60229	0.48961	0.35085	1.000	1.000	1a	1
171 H	H2	0.58312	0.35477	0.36096	1.000	1.000	1a	1

=====
=====

NiCoP H₂O*

Title CoNiP(0\0\2)

Lattice type P

Space group name P 1

Space group number 1

Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
9.95430	11.49420	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 2860.417794 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1	Co Co1	0.00000	0.36922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
2	Co Co2	0.00000	0.86922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
3	Co Co3	0.13078	0.06539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
4	Co Co4	0.13078	0.56539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
5	Co Co5	0.36922	0.31539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
6	Co Co6	0.36922	0.81539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
7	Co Co7	0.50000	0.11922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
8	Co Co8	0.50000	0.61922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
9	Co Co9	0.63078	0.31539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10	Co Co10	0.63078	0.81539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11	Co Co11	0.86922	0.06539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12	Co Co12	0.86922	0.56539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13	Co Co13	0.00000	0.36990	0.19845	1.000	1.000	1a	1
14	Co Co14	0.00000	0.86990	0.19845	1.000	1.000	1a	1
15	Co Co15	0.13094	0.06550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
16	Co Co16	0.13094	0.56550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
17	Co Co17	0.36906	0.31550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
18	Co Co18	0.36906	0.81550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
19	Co Co19	0.50000	0.11990	0.19845	1.000	1.000	1a	1
20	Co Co20	0.50000	0.61990	0.19845	1.000	1.000	1a	1
21	Co Co21	0.63094	0.31550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
22	Co Co22	0.63094	0.81550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
23	Co Co23	0.86906	0.06550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
24	Co Co24	0.86906	0.56550	0.19827	1.000	1.000	1a	1

25 Ni	Ni1	0.00000	0.19753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
26 Ni	Ni2	0.00000	0.69753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
27 Ni	Ni3	0.19753	0.40124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
28 Ni	Ni4	0.19753	0.90124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
29 Ni	Ni5	0.30247	0.15124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
30 Ni	Ni6	0.30247	0.65124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
31 Ni	Ni7	0.50000	0.44753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
32 Ni	Ni8	0.50000	0.94753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
33 Ni	Ni9	0.69753	0.15124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
34 Ni	Ni10	0.69753	0.65124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
35 Ni	Ni11	0.80247	0.40124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
36 Ni	Ni12	0.80247	0.90124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
37 Ni	Ni13	0.00000	0.19753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
38 Ni	Ni14	0.00000	0.69753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
39 Ni	Ni15	0.19753	0.40124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
40 Ni	Ni16	0.19753	0.90124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
41 Ni	Ni17	0.30247	0.15124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
42 Ni	Ni18	0.30247	0.65124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
43 Ni	Ni19	0.50000	0.44753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
44 Ni	Ni20	0.50000	0.94753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
45 Ni	Ni21	0.69753	0.15124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
46 Ni	Ni22	0.69753	0.65124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
47 Ni	Ni23	0.80247	0.40124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
48 Ni	Ni24	0.80247	0.90124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
49 Ni	Ni25	0.00000	0.19434	0.26006	1.000	1.000	1a	1
50 Ni	Ni26	0.00000	0.69434	0.26006	1.000	1.000	1a	1
51 Ni	Ni27	0.19450	0.40217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
52 Ni	Ni28	0.19450	0.90217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
53 Ni	Ni29	0.30550	0.15217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
54 Ni	Ni30	0.30550	0.65217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
55 Ni	Ni31	0.50000	0.44434	0.26006	1.000	1.000	1a	1
56 Ni	Ni32	0.50000	0.94434	0.26006	1.000	1.000	1a	1
57 Ni	Ni33	0.69450	0.15217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
58 Ni	Ni34	0.69450	0.65217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
59 Ni	Ni35	0.80550	0.40217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
60 Ni	Ni36	0.80550	0.90217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
61 P	P1	0.00000	0.00000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
62 P	P2	0.00000	0.50000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
63 P	P3	0.50000	0.25000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
64 P	P4	0.50000	0.75000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
65 P	P5	0.16667	0.25000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
66 P	P6	0.16667	0.75000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
67 P	P7	0.33333	0.00000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
68 P	P8	0.33333	0.50000	0.06562	1.000	1.000	1a	1

69 P	P9	0.66667	0.00000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
70 P	P10	0.66667	0.50000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
71 P	P11	0.83333	0.25000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
72 P	P12	0.83333	0.75000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
73 P	P13	0.00000	0.00000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
74 P	P14	0.00000	0.50000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
75 P	P15	0.50000	0.25000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
76 P	P16	0.50000	0.75000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
77 P	P17	0.16696	0.25025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
78 P	P18	0.16696	0.75025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
79 P	P19	0.33303	0.00025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
80 P	P20	0.33303	0.50025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
81 P	P21	0.66697	0.00025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
82 P	P22	0.66697	0.50025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
83 P	P23	0.83303	0.25025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
84 P	P24	0.83303	0.75025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
85 P	P25	0.00000	0.99926	0.26667	1.000	1.000	1a	1
86 P	P26	0.00000	0.49926	0.26667	1.000	1.000	1a	1
87 P	P27	0.50000	0.24926	0.26667	1.000	1.000	1a	1
88 P	P28	0.50000	0.74926	0.26667	1.000	1.000	1a	1
89 O	O1	0.50479	0.49791	0.34521	1.000	1.000	1a	1
90 H	H1	0.58956	0.54126	0.34750	1.000	1.000	1a	1
91 H	H2	0.43632	0.55944	0.34485	1.000	1.000	1a	1

=====
=====

CoP H-OH*

=====
=====

Title Co P O H

Lattice type P

Space group name P 1

Space group number 1

Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
10.05150	11.00530	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 2765.494303 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1	Co Co1	0.24946	0.34874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
2	Co Co2	0.24946	0.84874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
3	Co Co3	0.49946	0.40126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
4	Co Co4	0.49946	0.90126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
5	Co Co5	0.74946	0.34874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
6	Co Co6	0.74946	0.84874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
7	Co Co7	0.99946	0.40126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
8	Co Co8	0.99946	0.90126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
9	Co Co9	0.00054	0.09874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10	Co Co10	0.00054	0.59874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11	Co Co11	0.25054	0.15126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12	Co Co12	0.25054	0.65126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13	Co Co13	0.50054	0.09874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
14	Co Co14	0.50054	0.59874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
15	Co Co15	0.75054	0.15126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
16	Co Co16	0.75054	0.65126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
17	Co Co17	0.24946	0.34874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
18	Co Co18	0.24946	0.84874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
19	Co Co19	0.49946	0.40126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
20	Co Co20	0.49946	0.90126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
21	Co Co21	0.74946	0.34874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
22	Co Co22	0.74946	0.84874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
23	Co Co23	0.99946	0.40126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
24	Co Co24	0.99946	0.90126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
25	Co Co25	0.99782	0.10244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
26	Co Co26	0.99782	0.60244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
27	Co Co27	0.24781	0.14756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
28	Co Co28	0.24781	0.64756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
29	Co Co29	0.49782	0.10244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
30	Co Co30	0.49782	0.60244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
31	Co Co31	0.74782	0.14756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
32	Co Co32	0.74782	0.64756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
33	Co Co33	0.25280	0.35049	0.25144	1.000	1.000	1a	1
34	Co Co34	0.25139	0.84649	0.25035	1.000	1.000	1a	1
35	Co Co35	0.50369	0.39860	0.25486	1.000	1.000	1a	1
36	Co Co36	0.50198	0.90248	0.25095	1.000	1.000	1a	1
37	Co Co37	0.75325	0.34650	0.25061	1.000	1.000	1a	1
38	Co Co38	0.75198	0.84719	0.25020	1.000	1.000	1a	1
39	Co Co39	0.00286	0.40270	0.25176	1.000	1.000	1a	1
40	Co Co40	0.00249	0.90206	0.25101	1.000	1.000	1a	1

41 P	P1	0.09583	0.20919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
42 P	P2	0.09583	0.70919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
43 P	P3	0.34583	0.04081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
44 P	P4	0.34583	0.54081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
45 P	P5	0.59583	0.20919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
46 P	P6	0.59583	0.70919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
47 P	P7	0.84583	0.04081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
48 P	P8	0.84583	0.54081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
49 P	P9	0.15417	0.45919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
50 P	P10	0.15417	0.95919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
51 P	P11	0.40417	0.29081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
52 P	P12	0.40417	0.79081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
53 P	P13	0.65417	0.45919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
54 P	P14	0.65417	0.95919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
55 P	P15	0.90417	0.29081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
56 P	P16	0.90417	0.79081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
57 P	P17	0.09583	0.20919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
58 P	P18	0.09583	0.70919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
59 P	P19	0.34583	0.04081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
60 P	P20	0.34583	0.54081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
61 P	P21	0.59583	0.20919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
62 P	P22	0.59583	0.70919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
63 P	P23	0.84583	0.04081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
64 P	P24	0.84583	0.54081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
65 P	P25	0.15513	0.46395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
66 P	P26	0.15513	0.96395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
67 P	P27	0.40513	0.28605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
68 P	P28	0.40513	0.78605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
69 P	P29	0.65513	0.46395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
70 P	P30	0.65513	0.96395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
71 P	P31	0.90513	0.28605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
72 P	P32	0.90513	0.78605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
73 P	P33	0.09083	0.22107	0.26424	1.000	1.000	1a	1
74 P	P34	0.08958	0.71942	0.26493	1.000	1.000	1a	1
75 P	P35	0.33658	0.02621	0.26574	1.000	1.000	1a	1
76 P	P36	0.34519	0.53223	0.26263	1.000	1.000	1a	1
77 P	P37	0.59988	0.21033	0.26413	1.000	1.000	1a	1
78 P	P38	0.59164	0.72010	0.26538	1.000	1.000	1a	1
79 P	P39	0.83777	0.02718	0.26613	1.000	1.000	1a	1
80 P	P40	0.83698	0.52722	0.26627	1.000	1.000	1a	1
81 O	O1	0.49747	0.40291	0.33088	1.000	1.000	1a	1
82 H	H1	0.42704	0.35342	0.34694	1.000	1.000	1a	1
83 H	H2	0.35760	0.58084	0.31539	1.000	1.000	1a	1

=====
NiCoP-CoP H-OH*
=====

=====
Title Co Ni P O H

Lattice type P
Space group name P 1
Space group number 1
Setting number 1

Lattice parameters

 a b c alpha beta gamma
20.00560 11.24700 25.00000 90.0000 90.0000 90.0000

Unit-cell volume = 5625.074443 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1 Co	Co1	0.00675	0.40905	0.00000	1.000	1.000	1a	1
2 Co	Co2	0.00675	0.90905	0.00000	1.000	1.000	1a	1
3 Co	Co3	0.12814	0.34862	0.00000	1.000	1.000	1a	1
4 Co	Co4	0.12814	0.84862	0.00000	1.000	1.000	1a	1
5 Co	Co5	0.25523	0.39733	0.00000	1.000	1.000	1a	1
6 Co	Co6	0.25523	0.89733	0.00000	1.000	1.000	1a	1
7 Co	Co7	0.38277	0.35161	0.00000	1.000	1.000	1a	1
8 Co	Co8	0.38277	0.85161	0.00000	1.000	1.000	1a	1
9 Co	Co9	0.01686	0.09208	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10 Co	Co10	0.01686	0.59208	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11 Co	Co11	0.13517	0.14703	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12 Co	Co12	0.13517	0.64703	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13 Co	Co13	0.25705	0.10125	0.06562	1.000	1.000	1a	1
14 Co	Co14	0.25705	0.60125	0.06562	1.000	1.000	1a	1
15 Co	Co15	0.37959	0.14467	0.06562	1.000	1.000	1a	1
16 Co	Co16	0.37959	0.64467	0.06562	1.000	1.000	1a	1
17 Co	Co17	0.50387	0.08464	0.06562	1.000	1.000	1a	1
18 Co	Co18	0.50387	0.58464	0.06562	1.000	1.000	1a	1
19 Co	Co19	0.58720	0.27888	0.06562	1.000	1.000	1a	1
20 Co	Co20	0.58720	0.77888	0.06562	1.000	1.000	1a	1

21 Co	Co21	0.70394	0.02381	0.06562	1.000	1.000	1a	1
22 Co	Co22	0.70394	0.52381	0.06562	1.000	1.000	1a	1
23 Co	Co23	0.77258	0.32820	0.06562	1.000	1.000	1a	1
24 Co	Co24	0.77258	0.82820	0.06562	1.000	1.000	1a	1
25 Co	Co25	0.83653	0.02678	0.06562	1.000	1.000	1a	1
26 Co	Co26	0.83653	0.52678	0.06562	1.000	1.000	1a	1
27 Co	Co27	0.95638	0.27536	0.06562	1.000	1.000	1a	1
28 Co	Co28	0.95638	0.77536	0.06562	1.000	1.000	1a	1
29 Co	Co29	0.01381	0.40341	0.13125	1.000	1.000	1a	1
30 Co	Co30	0.01381	0.90341	0.13125	1.000	1.000	1a	1
31 Co	Co31	0.13239	0.34729	0.13125	1.000	1.000	1a	1
32 Co	Co32	0.13239	0.84729	0.13125	1.000	1.000	1a	1
33 Co	Co33	0.25310	0.39909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
34 Co	Co34	0.25310	0.89909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
35 Co	Co35	0.37623	0.35070	0.13125	1.000	1.000	1a	1
36 Co	Co36	0.37623	0.85070	0.13125	1.000	1.000	1a	1
37 Co	Co37	0.01463	0.09453	0.19676	1.000	1.000	1a	1
38 Co	Co38	0.01527	0.59530	0.19680	1.000	1.000	1a	1
39 Co	Co39	0.13267	0.14025	0.19686	1.000	1.000	1a	1
40 Co	Co40	0.13342	0.64001	0.19704	1.000	1.000	1a	1
41 Co	Co41	0.25462	0.10208	0.19821	1.000	1.000	1a	1
42 Co	Co42	0.25576	0.60276	0.19810	1.000	1.000	1a	1
43 Co	Co43	0.37684	0.14751	0.19735	1.000	1.000	1a	1
44 Co	Co44	0.37920	0.64742	0.19768	1.000	1.000	1a	1
45 Co	Co45	0.50249	0.09668	0.20049	1.000	1.000	1a	1
46 Co	Co46	0.50560	0.59732	0.20496	1.000	1.000	1a	1
47 Co	Co47	0.58555	0.27701	0.19954	1.000	1.000	1a	1
48 Co	Co48	0.58251	0.78329	0.19867	1.000	1.000	1a	1
49 Co	Co49	0.70220	0.02256	0.20049	1.000	1.000	1a	1
50 Co	Co50	0.70268	0.51856	0.20021	1.000	1.000	1a	1
51 Co	Co51	0.77168	0.32985	0.19861	1.000	1.000	1a	1
52 Co	Co52	0.77020	0.82888	0.19790	1.000	1.000	1a	1
53 Co	Co53	0.83299	0.02597	0.20042	1.000	1.000	1a	1
54 Co	Co54	0.83405	0.52682	0.19969	1.000	1.000	1a	1
55 Co	Co55	0.95584	0.28012	0.19749	1.000	1.000	1a	1
56 Co	Co56	0.95506	0.78026	0.19804	1.000	1.000	1a	1
57 Co	Co57	0.00805	0.41571	0.26111	1.000	1.000	1a	1
58 Co	Co58	0.00802	0.91586	0.26114	1.000	1.000	1a	1
59 Co	Co59	0.12771	0.33964	0.25403	1.000	1.000	1a	1
60 Co	Co60	0.12780	0.83948	0.25385	1.000	1.000	1a	1
61 Co	Co61	0.25499	0.39845	0.24985	1.000	1.000	1a	1
62 Co	Co62	0.25522	0.89791	0.25044	1.000	1.000	1a	1
63 Co	Co63	0.38042	0.35077	0.25278	1.000	1.000	1a	1
64 Co	Co64	0.38148	0.85186	0.25201	1.000	1.000	1a	1

65 Ni	Ni1	0.51052	0.40283	0.00000	1.000	1.000	1a	1
66 Ni	Ni2	0.51052	0.90283	0.00000	1.000	1.000	1a	1
67 Ni	Ni3	0.62146	0.10806	0.00000	1.000	1.000	1a	1
68 Ni	Ni4	0.62146	0.60806	0.00000	1.000	1.000	1a	1
69 Ni	Ni5	0.67694	0.35784	0.00000	1.000	1.000	1a	1
70 Ni	Ni6	0.67694	0.85784	0.00000	1.000	1.000	1a	1
71 Ni	Ni7	0.76923	0.15455	0.00000	1.000	1.000	1a	1
72 Ni	Ni8	0.76923	0.65455	0.00000	1.000	1.000	1a	1
73 Ni	Ni9	0.86953	0.35916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
74 Ni	Ni10	0.86953	0.85916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
75 Ni	Ni11	0.93046	0.11273	0.00000	1.000	1.000	1a	1
76 Ni	Ni12	0.93046	0.61273	0.00000	1.000	1.000	1a	1
77 Ni	Ni13	0.50670	0.39909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
78 Ni	Ni14	0.50670	0.89909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
79 Ni	Ni15	0.62370	0.10922	0.13125	1.000	1.000	1a	1
80 Ni	Ni16	0.62370	0.60922	0.13125	1.000	1.000	1a	1
81 Ni	Ni17	0.67014	0.36192	0.13125	1.000	1.000	1a	1
82 Ni	Ni18	0.67014	0.86192	0.13125	1.000	1.000	1a	1
83 Ni	Ni19	0.77115	0.15432	0.13125	1.000	1.000	1a	1
84 Ni	Ni20	0.77115	0.65432	0.13125	1.000	1.000	1a	1
85 Ni	Ni21	0.87340	0.36151	0.13125	1.000	1.000	1a	1
86 Ni	Ni22	0.87340	0.86151	0.13125	1.000	1.000	1a	1
87 Ni	Ni23	0.91952	0.11549	0.13125	1.000	1.000	1a	1
88 Ni	Ni24	0.91952	0.61549	0.13125	1.000	1.000	1a	1
89 Ni	Ni25	0.50681	0.39780	0.25318	1.000	1.000	1a	1
90 Ni	Ni26	0.50679	0.90914	0.25428	1.000	1.000	1a	1
91 Ni	Ni27	0.63597	0.13127	0.27076	1.000	1.000	1a	1
92 Ni	Ni28	0.62449	0.61957	0.26295	1.000	1.000	1a	1
93 Ni	Ni29	0.68089	0.34758	0.27003	1.000	1.000	1a	1
94 Ni	Ni30	0.66980	0.85622	0.26250	1.000	1.000	1a	1
95 Ni	Ni31	0.77190	0.15611	0.26364	1.000	1.000	1a	1
96 Ni	Ni32	0.76884	0.65632	0.26229	1.000	1.000	1a	1
97 Ni	Ni33	0.87034	0.36246	0.26221	1.000	1.000	1a	1
98 Ni	Ni34	0.86758	0.86281	0.26246	1.000	1.000	1a	1
99 Ni	Ni35	0.92666	0.12242	0.26334	1.000	1.000	1a	1
100 Ni	Ni36	0.92716	0.62170	0.26331	1.000	1.000	1a	1
101 P	P1	0.03409	0.21848	0.00000	1.000	1.000	1a	1
102 P	P2	0.03409	0.71848	0.00000	1.000	1.000	1a	1
103 P	P3	0.17390	0.02890	0.00000	1.000	1.000	1a	1
104 P	P4	0.17390	0.52890	0.00000	1.000	1.000	1a	1
105 P	P5	0.29813	0.21916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
106 P	P6	0.29813	0.71916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
107 P	P7	0.42362	0.03145	0.00000	1.000	1.000	1a	1
108 P	P8	0.42362	0.53145	0.00000	1.000	1.000	1a	1

109 P	P9	0.52912	0.20886	0.00000	1.000	1.000	1a	1
110 P	P10	0.52912	0.70886	0.00000	1.000	1.000	1a	1
111 P	P11	0.77143	0.45725	0.00000	1.000	1.000	1a	1
112 P	P12	0.77143	0.95725	0.00000	1.000	1.000	1a	1
113 P	P13	0.08693	0.45321	0.06562	1.000	1.000	1a	1
114 P	P14	0.08693	0.95321	0.06562	1.000	1.000	1a	1
115 P	P15	0.20538	0.29402	0.06562	1.000	1.000	1a	1
116 P	P16	0.20538	0.79402	0.06562	1.000	1.000	1a	1
117 P	P17	0.32908	0.45438	0.06562	1.000	1.000	1a	1
118 P	P18	0.32908	0.95438	0.06562	1.000	1.000	1a	1
119 P	P19	0.44768	0.29725	0.06562	1.000	1.000	1a	1
120 P	P20	0.44768	0.79725	0.06562	1.000	1.000	1a	1
121 P	P21	0.59766	0.46715	0.06562	1.000	1.000	1a	1
122 P	P22	0.59766	0.96715	0.06562	1.000	1.000	1a	1
123 P	P23	0.68981	0.21162	0.06562	1.000	1.000	1a	1
124 P	P24	0.68981	0.71162	0.06562	1.000	1.000	1a	1
125 P	P25	0.85529	0.21141	0.06562	1.000	1.000	1a	1
126 P	P26	0.85529	0.71141	0.06562	1.000	1.000	1a	1
127 P	P27	0.93738	0.46256	0.06562	1.000	1.000	1a	1
128 P	P28	0.93738	0.96256	0.06562	1.000	1.000	1a	1
129 P	P29	0.03746	0.21394	0.13125	1.000	1.000	1a	1
130 P	P30	0.03746	0.71394	0.13125	1.000	1.000	1a	1
131 P	P31	0.17801	0.04371	0.13125	1.000	1.000	1a	1
132 P	P32	0.17801	0.54371	0.13125	1.000	1.000	1a	1
133 P	P33	0.30152	0.20524	0.13125	1.000	1.000	1a	1
134 P	P34	0.30152	0.70524	0.13125	1.000	1.000	1a	1
135 P	P35	0.42559	0.04086	0.13125	1.000	1.000	1a	1
136 P	P36	0.42559	0.54086	0.13125	1.000	1.000	1a	1
137 P	P37	0.53204	0.20422	0.13125	1.000	1.000	1a	1
138 P	P38	0.53204	0.70422	0.13125	1.000	1.000	1a	1
139 P	P39	0.77155	0.45710	0.13125	1.000	1.000	1a	1
140 P	P40	0.77155	0.95710	0.13125	1.000	1.000	1a	1
141 P	P41	0.08591	0.45711	0.19776	1.000	1.000	1a	1
142 P	P42	0.08560	0.95686	0.19774	1.000	1.000	1a	1
143 P	P43	0.20525	0.28300	0.19678	1.000	1.000	1a	1
144 P	P44	0.20568	0.78315	0.19683	1.000	1.000	1a	1
145 P	P45	0.33254	0.46507	0.19791	1.000	1.000	1a	1
146 P	P46	0.33168	0.96430	0.19746	1.000	1.000	1a	1
147 P	P47	0.45285	0.28505	0.19827	1.000	1.000	1a	1
148 P	P48	0.45701	0.78390	0.20062	1.000	1.000	1a	1
149 P	P49	0.59747	0.46837	0.20629	1.000	1.000	1a	1
150 P	P50	0.59717	0.97522	0.20846	1.000	1.000	1a	1
151 P	P51	0.68931	0.21214	0.20033	1.000	1.000	1a	1
152 P	P52	0.68717	0.70976	0.20106	1.000	1.000	1a	1

153 P	P53	0.85566	0.21103	0.20270	1.000	1.000	1a	1
154 P	P54	0.85485	0.71224	0.20312	1.000	1.000	1a	1
155 P	P55	0.93470	0.46726	0.20057	1.000	1.000	1a	1
156 P	P56	0.93378	0.96684	0.20108	1.000	1.000	1a	1
157 P	P57	0.02936	0.22395	0.26253	1.000	1.000	1a	1
158 P	P58	0.02933	0.72431	0.26256	1.000	1.000	1a	1
159 P	P59	0.17269	0.02112	0.26311	1.000	1.000	1a	1
160 P	P60	0.17302	0.52169	0.26335	1.000	1.000	1a	1
161 P	P61	0.29895	0.22163	0.26553	1.000	1.000	1a	1
162 P	P62	0.30071	0.72177	0.26520	1.000	1.000	1a	1
163 P	P63	0.42118	0.03314	0.26753	1.000	1.000	1a	1
164 P	P64	0.42372	0.52888	0.26738	1.000	1.000	1a	1
165 P	P65	0.53635	0.20627	0.27625	1.000	1.000	1a	1
166 P	P66	0.54285	0.73256	0.28180	1.000	1.000	1a	1
167 P	P67	0.77236	0.45864	0.26897	1.000	1.000	1a	1
168 P	P68	0.76799	0.95624	0.26952	1.000	1.000	1a	1
169 O	O1	0.62739	0.39766	0.33069	1.000	1.000	1a	1
170 H	H1	0.64996	0.39043	0.36519	1.000	1.000	1a	1
171 H	H2	0.62906	0.24387	0.30987	1.000	1.000	1a	1

=====
 ===

NiCoP H-OH*

=====
 ===

Title Co Ni P O H

Lattice type P

Space group name P 1

Space group number 1

Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
9.95430	11.49420	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 2860.417794 Å³

Structure parameters

x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
---	---	---	------	---	------	------

1	Co	Co1	0.00000	0.36922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
2	Co	Co2	0.00000	0.86922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
3	Co	Co3	0.13078	0.06539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
4	Co	Co4	0.13078	0.56539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
5	Co	Co5	0.36922	0.31539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
6	Co	Co6	0.36922	0.81539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
7	Co	Co7	0.50000	0.11922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
8	Co	Co8	0.50000	0.61922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
9	Co	Co9	0.63078	0.31539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10	Co	Co10	0.63078	0.81539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11	Co	Co11	0.86922	0.06539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12	Co	Co12	0.86922	0.56539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13	Co	Co13	0.99702	0.36973	0.19681	1.000	1.000	1a	1
14	Co	Co14	0.00208	0.86826	0.19964	1.000	1.000	1a	1
15	Co	Co15	0.13104	0.06533	0.19835	1.000	1.000	1a	1
16	Co	Co16	0.13317	0.56095	0.20142	1.000	1.000	1a	1
17	Co	Co17	0.36904	0.31867	0.19940	1.000	1.000	1a	1
18	Co	Co18	0.36833	0.81263	0.19984	1.000	1.000	1a	1
19	Co	Co19	0.49790	0.12076	0.19863	1.000	1.000	1a	1
20	Co	Co20	0.50077	0.62011	0.19776	1.000	1.000	1a	1
21	Co	Co21	0.62815	0.31712	0.19863	1.000	1.000	1a	1
22	Co	Co22	0.63279	0.81526	0.19766	1.000	1.000	1a	1
23	Co	Co23	0.86995	0.06503	0.19862	1.000	1.000	1a	1
24	Co	Co24	0.86934	0.56458	0.19794	1.000	1.000	1a	1
25	Ni	Ni1	0.00000	0.19753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
26	Ni	Ni2	0.00000	0.69753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
27	Ni	Ni3	0.19753	0.40124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
28	Ni	Ni4	0.19753	0.90124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
29	Ni	Ni5	0.30247	0.15124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
30	Ni	Ni6	0.30247	0.65124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
31	Ni	Ni7	0.50000	0.44753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
32	Ni	Ni8	0.50000	0.94753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
33	Ni	Ni9	0.69753	0.15124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
34	Ni	Ni10	0.69753	0.65124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
35	Ni	Ni11	0.80247	0.40124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
36	Ni	Ni12	0.80247	0.90124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
37	Ni	Ni13	0.00000	0.19753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
38	Ni	Ni14	0.00000	0.69753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
39	Ni	Ni15	0.19753	0.40124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
40	Ni	Ni16	0.19753	0.90124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
41	Ni	Ni17	0.30247	0.15124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
42	Ni	Ni18	0.30247	0.65124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
43	Ni	Ni19	0.50000	0.44753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
44	Ni	Ni20	0.50000	0.94753	0.13125	1.000	1.000	1a	1

45 Ni	Ni21	0.69753	0.15124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
46 Ni	Ni22	0.69753	0.65124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
47 Ni	Ni23	0.80247	0.40124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
48 Ni	Ni24	0.80247	0.90124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
49 Ni	Ni25	0.00208	0.19603	0.26029	1.000	1.000	1a	1
50 Ni	Ni26	0.99593	0.69068	0.26096	1.000	1.000	1a	1
51 Ni	Ni27	0.17514	0.38144	0.26548	1.000	1.000	1a	1
52 Ni	Ni28	0.19502	0.90465	0.26126	1.000	1.000	1a	1
53 Ni	Ni29	0.30199	0.15821	0.26095	1.000	1.000	1a	1
54 Ni	Ni30	0.31884	0.64980	0.26599	1.000	1.000	1a	1
55 Ni	Ni31	0.51731	0.44754	0.26582	1.000	1.000	1a	1
56 Ni	Ni32	0.50254	0.94508	0.25994	1.000	1.000	1a	1
57 Ni	Ni33	0.69349	0.15231	0.26031	1.000	1.000	1a	1
58 Ni	Ni34	0.69747	0.65192	0.25997	1.000	1.000	1a	1
59 Ni	Ni35	0.80344	0.40216	0.26036	1.000	1.000	1a	1
60 Ni	Ni36	0.80502	0.90255	0.26044	1.000	1.000	1a	1
61 P	P1	0.00000	0.00000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
62 P	P2	0.00000	0.50000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
63 P	P3	0.50000	0.25000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
64 P	P4	0.50000	0.75000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
65 P	P5	0.16667	0.25000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
66 P	P6	0.16667	0.75000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
67 P	P7	0.33333	0.00000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
68 P	P8	0.33333	0.50000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
69 P	P9	0.66667	0.00000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
70 P	P10	0.66667	0.50000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
71 P	P11	0.83333	0.25000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
72 P	P12	0.83333	0.75000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
73 P	P13	0.00000	0.00000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
74 P	P14	0.00000	0.50000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
75 P	P15	0.50000	0.25000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
76 P	P16	0.50000	0.75000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
77 P	P17	0.16596	0.25027	0.19810	1.000	1.000	1a	1
78 P	P18	0.16842	0.74611	0.20475	1.000	1.000	1a	1
79 P	P19	0.33305	0.99952	0.20200	1.000	1.000	1a	1
80 P	P20	0.33472	0.50129	0.19804	1.000	1.000	1a	1
81 P	P21	0.66656	0.00109	0.20074	1.000	1.000	1a	1
82 P	P22	0.66715	0.50035	0.19972	1.000	1.000	1a	1
83 P	P23	0.83092	0.24953	0.20107	1.000	1.000	1a	1
84 P	P24	0.83497	0.75014	0.20013	1.000	1.000	1a	1
85 P	P25	-0.00031	1.00025	0.26705	1.000	1.000	1a	1
86 P	P26	0.99804	0.49427	0.26774	1.000	1.000	1a	1
87 P	P27	0.50083	0.25104	0.26664	1.000	1.000	1a	1
88 P	P28	0.50721	0.75333	0.26647	1.000	1.000	1a	1

89	O	O1	0.39336	0.52511	0.31592	1.000	1.000	1a	1
90	H	H1	0.42954	0.55017	0.35037	1.000	1.000	1a	1
91	H	H2	0.25995	0.41016	0.31368	1.000	1.000	1a	1

=====
 ===

CoP H*+OH*

=====
 ===

Title CoP(2\0\0)

Lattice type P
 Space group name P 1
 Space group number 1
 Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
10.05150	11.00530	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 2765.494303 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.	
1	Co	Co1	0.24946	0.34874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
2	Co	Co2	0.24946	0.84874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
3	Co	Co3	0.49946	0.40126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
4	Co	Co4	0.49946	0.90126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
5	Co	Co5	0.74946	0.34874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
6	Co	Co6	0.74946	0.84874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
7	Co	Co7	0.99946	0.40126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
8	Co	Co8	0.99946	0.90126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
9	Co	Co9	0.00054	0.09874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10	Co	Co10	0.00054	0.59874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11	Co	Co11	0.25054	0.15126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12	Co	Co12	0.25054	0.65126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13	Co	Co13	0.50054	0.09874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
14	Co	Co14	0.50054	0.59874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
15	Co	Co15	0.75054	0.15126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
16	Co	Co16	0.75054	0.65126	0.06562	1.000	1.000	1a	1

17 Co	Co17	0.24946	0.34874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
18 Co	Co18	0.24946	0.84874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
19 Co	Co19	0.49946	0.40126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
20 Co	Co20	0.49946	0.90126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
21 Co	Co21	0.74946	0.34874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
22 Co	Co22	0.74946	0.84874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
23 Co	Co23	0.99946	0.40126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
24 Co	Co24	0.99946	0.90126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
25 Co	Co25	0.99782	0.10244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
26 Co	Co26	0.99782	0.60244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
27 Co	Co27	0.24781	0.14756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
28 Co	Co28	0.24781	0.64756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
29 Co	Co29	0.49782	0.10244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
30 Co	Co30	0.49782	0.60244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
31 Co	Co31	0.74782	0.14756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
32 Co	Co32	0.74782	0.64756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
33 Co	Co33	0.24861	0.35000	0.25330	1.000	1.000	1a	1
34 Co	Co34	0.25242	0.84801	0.25053	1.000	1.000	1a	1
35 Co	Co35	0.50603	0.39799	0.25657	1.000	1.000	1a	1
36 Co	Co36	0.50127	0.90353	0.25046	1.000	1.000	1a	1
37 Co	Co37	0.74810	0.35050	0.25531	1.000	1.000	1a	1
38 Co	Co38	0.75152	0.84751	0.25062	1.000	1.000	1a	1
39 Co	Co39	0.00710	0.40092	0.25343	1.000	1.000	1a	1
40 Co	Co40	0.00140	0.90328	0.25028	1.000	1.000	1a	1
41 P	P1	0.09583	0.20919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
42 P	P2	0.09583	0.70919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
43 P	P3	0.34583	0.04081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
44 P	P4	0.34583	0.54081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
45 P	P5	0.59583	0.20919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
46 P	P6	0.59583	0.70919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
47 P	P7	0.84583	0.04081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
48 P	P8	0.84583	0.54081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
49 P	P9	0.15417	0.45919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
50 P	P10	0.15417	0.95919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
51 P	P11	0.40417	0.29081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
52 P	P12	0.40417	0.79081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
53 P	P13	0.65417	0.45919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
54 P	P14	0.65417	0.95919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
55 P	P15	0.90417	0.29081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
56 P	P16	0.90417	0.79081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
57 P	P17	0.09583	0.20919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
58 P	P18	0.09583	0.70919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
59 P	P19	0.34583	0.04081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
60 P	P20	0.34583	0.54081	0.13125	1.000	1.000	1a	1

61 P	P21	0.59583	0.20919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
62 P	P22	0.59583	0.70919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
63 P	P23	0.84583	0.04081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
64 P	P24	0.84583	0.54081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
65 P	P25	0.15513	0.46395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
66 P	P26	0.15513	0.96395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
67 P	P27	0.40513	0.28605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
68 P	P28	0.40513	0.78605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
69 P	P29	0.65513	0.46395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
70 P	P30	0.65513	0.96395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
71 P	P31	0.90513	0.28605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
72 P	P32	0.90513	0.78605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
73 P	P33	0.08836	0.21257	0.26482	1.000	1.000	1a	1
74 P	P34	0.08964	0.72281	0.26597	1.000	1.000	1a	1
75 P	P35	0.33814	0.02877	0.26627	1.000	1.000	1a	1
76 P	P36	0.34800	0.53411	0.26648	1.000	1.000	1a	1
77 P	P37	0.58878	0.20597	0.26356	1.000	1.000	1a	1
78 P	P38	0.58754	0.72271	0.26621	1.000	1.000	1a	1
79 P	P39	0.83827	0.02857	0.26601	1.000	1.000	1a	1
80 P	P40	0.85494	0.53798	0.26401	1.000	1.000	1a	1
81 O	O1	0.63395	0.41851	0.31398	1.000	1.000	1a	1
82 H	H1	0.65852	0.50327	0.32201	1.000	1.000	1a	1
83 H	H2	0.14547	0.41837	0.29285	1.000	1.000	1a	1

=====
 ===

NiCoP-CoP H*+OH*

=====
 ===

Title opt-Test

Lattice type P

Space group name P 1

Space group number 1

Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
20.00560	11.24700	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 5625.074443 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1	Co Co1	0.00675	0.40905	0.00000	1.000	1.000	1a	1
2	Co Co2	0.00675	0.90905	0.00000	1.000	1.000	1a	1
3	Co Co3	0.12814	0.34862	0.00000	1.000	1.000	1a	1
4	Co Co4	0.12814	0.84862	0.00000	1.000	1.000	1a	1
5	Co Co5	0.25523	0.39733	0.00000	1.000	1.000	1a	1
6	Co Co6	0.25523	0.89733	0.00000	1.000	1.000	1a	1
7	Co Co7	0.38277	0.35161	0.00000	1.000	1.000	1a	1
8	Co Co8	0.38277	0.85161	0.00000	1.000	1.000	1a	1
9	Co Co9	0.01686	0.09208	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10	Co Co10	0.01686	0.59208	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11	Co Co11	0.13517	0.14703	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12	Co Co12	0.13517	0.64703	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13	Co Co13	0.25705	0.10125	0.06562	1.000	1.000	1a	1
14	Co Co14	0.25705	0.60125	0.06562	1.000	1.000	1a	1
15	Co Co15	0.37959	0.14467	0.06562	1.000	1.000	1a	1
16	Co Co16	0.37959	0.64467	0.06562	1.000	1.000	1a	1
17	Co Co17	0.50387	0.08464	0.06562	1.000	1.000	1a	1
18	Co Co18	0.50387	0.58464	0.06562	1.000	1.000	1a	1
19	Co Co19	0.58720	0.27888	0.06562	1.000	1.000	1a	1
20	Co Co20	0.58720	0.77888	0.06562	1.000	1.000	1a	1
21	Co Co21	0.70394	0.02381	0.06562	1.000	1.000	1a	1
22	Co Co22	0.70394	0.52381	0.06562	1.000	1.000	1a	1
23	Co Co23	0.77258	0.32820	0.06562	1.000	1.000	1a	1
24	Co Co24	0.77258	0.82820	0.06562	1.000	1.000	1a	1
25	Co Co25	0.83653	0.02678	0.06562	1.000	1.000	1a	1
26	Co Co26	0.83653	0.52678	0.06562	1.000	1.000	1a	1
27	Co Co27	0.95638	0.27536	0.06562	1.000	1.000	1a	1
28	Co Co28	0.95638	0.77536	0.06562	1.000	1.000	1a	1
29	Co Co29	0.01381	0.40341	0.13125	1.000	1.000	1a	1
30	Co Co30	0.01381	0.90341	0.13125	1.000	1.000	1a	1
31	Co Co31	0.13239	0.34729	0.13125	1.000	1.000	1a	1
32	Co Co32	0.13239	0.84729	0.13125	1.000	1.000	1a	1
33	Co Co33	0.25310	0.39909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
34	Co Co34	0.25310	0.89909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
35	Co Co35	0.37623	0.35070	0.13125	1.000	1.000	1a	1
36	Co Co36	0.37623	0.85070	0.13125	1.000	1.000	1a	1
37	Co Co37	0.01475	0.09492	0.19657	1.000	1.000	1a	1
38	Co Co38	0.01514	0.59573	0.19689	1.000	1.000	1a	1
39	Co Co39	0.13303	0.14032	0.19691	1.000	1.000	1a	1
40	Co Co40	0.13328	0.64000	0.19688	1.000	1.000	1a	1
41	Co Co41	0.25541	0.10321	0.19853	1.000	1.000	1a	1

42 Co	Co42	0.25551	0.60234	0.19849	1.000	1.000	1a	1
43 Co	Co43	0.37816	0.14697	0.19770	1.000	1.000	1a	1
44 Co	Co44	0.37791	0.64497	0.19815	1.000	1.000	1a	1
45 Co	Co45	0.50360	0.09406	0.20043	1.000	1.000	1a	1
46 Co	Co46	0.50329	0.59198	0.20045	1.000	1.000	1a	1
47 Co	Co47	0.58639	0.27477	0.19938	1.000	1.000	1a	1
48 Co	Co48	0.58456	0.77349	0.20161	1.000	1.000	1a	1
49 Co	Co49	0.70305	0.02152	0.19767	1.000	1.000	1a	1
50 Co	Co50	0.70158	0.51720	0.20063	1.000	1.000	1a	1
51 Co	Co51	0.77140	0.32938	0.19819	1.000	1.000	1a	1
52 Co	Co52	0.76994	0.82815	0.19855	1.000	1.000	1a	1
53 Co	Co53	0.83266	0.02809	0.20171	1.000	1.000	1a	1
54 Co	Co54	0.83365	0.52648	0.19967	1.000	1.000	1a	1
55 Co	Co55	0.95566	0.28059	0.19777	1.000	1.000	1a	1
56 Co	Co56	0.95475	0.78094	0.19808	1.000	1.000	1a	1
57 Co	Co57	0.00803	0.41578	0.26113	1.000	1.000	1a	1
58 Co	Co58	0.00803	0.91652	0.26109	1.000	1.000	1a	1
59 Co	Co59	0.12767	0.33996	0.25408	1.000	1.000	1a	1
60 Co	Co60	0.12767	0.83971	0.25370	1.000	1.000	1a	1
61 Co	Co61	0.25511	0.39846	0.25073	1.000	1.000	1a	1
62 Co	Co62	0.25484	0.89846	0.25025	1.000	1.000	1a	1
63 Co	Co63	0.38222	0.35132	0.25385	1.000	1.000	1a	1
64 Co	Co64	0.38080	0.85125	0.25338	1.000	1.000	1a	1
65 Ni	Ni1	0.51052	0.40283	0.00000	1.000	1.000	1a	1
66 Ni	Ni2	0.51052	0.90283	0.00000	1.000	1.000	1a	1
67 Ni	Ni3	0.62146	0.10806	0.00000	1.000	1.000	1a	1
68 Ni	Ni4	0.62146	0.60806	0.00000	1.000	1.000	1a	1
69 Ni	Ni5	0.67694	0.35784	0.00000	1.000	1.000	1a	1
70 Ni	Ni6	0.67694	0.85784	0.00000	1.000	1.000	1a	1
71 Ni	Ni7	0.76923	0.15455	0.00000	1.000	1.000	1a	1
72 Ni	Ni8	0.76923	0.65455	0.00000	1.000	1.000	1a	1
73 Ni	Ni9	0.86953	0.35916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
74 Ni	Ni10	0.86953	0.85916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
75 Ni	Ni11	0.93046	0.11273	0.00000	1.000	1.000	1a	1
76 Ni	Ni12	0.93046	0.61273	0.00000	1.000	1.000	1a	1
77 Ni	Ni13	0.50670	0.39909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
78 Ni	Ni14	0.50670	0.89909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
79 Ni	Ni15	0.62370	0.10922	0.13125	1.000	1.000	1a	1
80 Ni	Ni16	0.62370	0.60922	0.13125	1.000	1.000	1a	1
81 Ni	Ni17	0.67014	0.36192	0.13125	1.000	1.000	1a	1
82 Ni	Ni18	0.67014	0.86192	0.13125	1.000	1.000	1a	1
83 Ni	Ni19	0.77115	0.15432	0.13125	1.000	1.000	1a	1
84 Ni	Ni20	0.77115	0.65432	0.13125	1.000	1.000	1a	1
85 Ni	Ni21	0.87340	0.36151	0.13125	1.000	1.000	1a	1

86 Ni	Ni22	0.87340	0.86151	0.13125	1.000	1.000	1a	1
87 Ni	Ni23	0.91952	0.11549	0.13125	1.000	1.000	1a	1
88 Ni	Ni24	0.91952	0.61549	0.13125	1.000	1.000	1a	1
89 Ni	Ni25	0.51086	0.39603	0.25653	1.000	1.000	1a	1
90 Ni	Ni26	0.50571	0.89958	0.25211	1.000	1.000	1a	1
91 Ni	Ni27	0.64159	0.12360	0.27156	1.000	1.000	1a	1
92 Ni	Ni28	0.62123	0.60790	0.26657	1.000	1.000	1a	1
93 Ni	Ni29	0.67856	0.34496	0.27012	1.000	1.000	1a	1
94 Ni	Ni30	0.67183	0.86517	0.26239	1.000	1.000	1a	1
95 Ni	Ni31	0.76767	0.15972	0.26635	1.000	1.000	1a	1
96 Ni	Ni32	0.77026	0.65417	0.26302	1.000	1.000	1a	1
97 Ni	Ni33	0.87002	0.36418	0.26202	1.000	1.000	1a	1
98 Ni	Ni34	0.86742	0.86145	0.26264	1.000	1.000	1a	1
99 Ni	Ni35	0.92732	0.12267	0.26347	1.000	1.000	1a	1
100 Ni	Ni36	0.92636	0.62161	0.26323	1.000	1.000	1a	1
101 P	P1	0.03409	0.21848	0.00000	1.000	1.000	1a	1
102 P	P2	0.03409	0.71848	0.00000	1.000	1.000	1a	1
103 P	P3	0.17390	0.02890	0.00000	1.000	1.000	1a	1
104 P	P4	0.17390	0.52890	0.00000	1.000	1.000	1a	1
105 P	P5	0.29813	0.21916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
106 P	P6	0.29813	0.71916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
107 P	P7	0.42362	0.03145	0.00000	1.000	1.000	1a	1
108 P	P8	0.42362	0.53145	0.00000	1.000	1.000	1a	1
109 P	P9	0.52912	0.20886	0.00000	1.000	1.000	1a	1
110 P	P10	0.52912	0.70886	0.00000	1.000	1.000	1a	1
111 P	P11	0.77143	0.45725	0.00000	1.000	1.000	1a	1
112 P	P12	0.77143	0.95725	0.00000	1.000	1.000	1a	1
113 P	P13	0.08693	0.45321	0.06562	1.000	1.000	1a	1
114 P	P14	0.08693	0.95321	0.06562	1.000	1.000	1a	1
115 P	P15	0.20538	0.29402	0.06562	1.000	1.000	1a	1
116 P	P16	0.20538	0.79402	0.06562	1.000	1.000	1a	1
117 P	P17	0.32908	0.45438	0.06562	1.000	1.000	1a	1
118 P	P18	0.32908	0.95438	0.06562	1.000	1.000	1a	1
119 P	P19	0.44768	0.29725	0.06562	1.000	1.000	1a	1
120 P	P20	0.44768	0.79725	0.06562	1.000	1.000	1a	1
121 P	P21	0.59766	0.46715	0.06562	1.000	1.000	1a	1
122 P	P22	0.59766	0.96715	0.06562	1.000	1.000	1a	1
123 P	P23	0.68981	0.21162	0.06562	1.000	1.000	1a	1
124 P	P24	0.68981	0.71162	0.06562	1.000	1.000	1a	1
125 P	P25	0.85529	0.21141	0.06562	1.000	1.000	1a	1
126 P	P26	0.85529	0.71141	0.06562	1.000	1.000	1a	1
127 P	P27	0.93738	0.46256	0.06562	1.000	1.000	1a	1
128 P	P28	0.93738	0.96256	0.06562	1.000	1.000	1a	1
129 P	P29	0.03746	0.21394	0.13125	1.000	1.000	1a	1

130 P	P30	0.03746	0.71394	0.13125	1.000	1.000	1a	1
131 P	P31	0.17801	0.04371	0.13125	1.000	1.000	1a	1
132 P	P32	0.17801	0.54371	0.13125	1.000	1.000	1a	1
133 P	P33	0.30152	0.20524	0.13125	1.000	1.000	1a	1
134 P	P34	0.30152	0.70524	0.13125	1.000	1.000	1a	1
135 P	P35	0.42559	0.04086	0.13125	1.000	1.000	1a	1
136 P	P36	0.42559	0.54086	0.13125	1.000	1.000	1a	1
137 P	P37	0.53204	0.20422	0.13125	1.000	1.000	1a	1
138 P	P38	0.53204	0.70422	0.13125	1.000	1.000	1a	1
139 P	P39	0.77155	0.45710	0.13125	1.000	1.000	1a	1
140 P	P40	0.77155	0.95710	0.13125	1.000	1.000	1a	1
141 P	P41	0.08574	0.45725	0.19774	1.000	1.000	1a	1
142 P	P42	0.08556	0.95732	0.19764	1.000	1.000	1a	1
143 P	P43	0.20531	0.28366	0.19700	1.000	1.000	1a	1
144 P	P44	0.20548	0.78310	0.19671	1.000	1.000	1a	1
145 P	P45	0.33200	0.46270	0.19811	1.000	1.000	1a	1
146 P	P46	0.33214	0.96439	0.19801	1.000	1.000	1a	1
147 P	P47	0.45517	0.28460	0.20036	1.000	1.000	1a	1
148 P	P48	0.45255	0.78382	0.19816	1.000	1.000	1a	1
149 P	P49	0.59626	0.46662	0.19929	1.000	1.000	1a	1
150 P	P50	0.59772	0.97226	0.21105	1.000	1.000	1a	1
151 P	P51	0.68950	0.21040	0.19814	1.000	1.000	1a	1
152 P	P52	0.68736	0.70783	0.20502	1.000	1.000	1a	1
153 P	P53	0.85548	0.21216	0.20333	1.000	1.000	1a	1
154 P	P54	0.85475	0.71202	0.20276	1.000	1.000	1a	1
155 P	P55	0.93458	0.46766	0.20055	1.000	1.000	1a	1
156 P	P56	0.93356	0.96759	0.20127	1.000	1.000	1a	1
157 P	P57	0.02968	0.22415	0.26238	1.000	1.000	1a	1
158 P	P58	0.02856	0.72477	0.26259	1.000	1.000	1a	1
159 P	P59	0.17238	0.02151	0.26331	1.000	1.000	1a	1
160 P	P60	0.17263	0.52208	0.26354	1.000	1.000	1a	1
161 P	P61	0.30009	0.22261	0.26529	1.000	1.000	1a	1
162 P	P62	0.29916	0.72234	0.26519	1.000	1.000	1a	1
163 P	P63	0.42398	0.03235	0.26699	1.000	1.000	1a	1
164 P	P64	0.42642	0.53097	0.26734	1.000	1.000	1a	1
165 P	P65	0.54220	0.20358	0.27514	1.000	1.000	1a	1
166 P	P66	0.53140	0.71112	0.27670	1.000	1.000	1a	1
167 P	P67	0.77137	0.45604	0.26878	1.000	1.000	1a	1
168 P	P68	0.76909	0.95982	0.26937	1.000	1.000	1a	1
169 O	O1	0.60904	0.45914	0.30925	1.000	1.000	1a	1
170 H	H1	0.60784	0.46633	0.34817	1.000	1.000	1a	1
171 H	H2	0.69982	0.21479	0.30475	1.000	1.000	1a	1

=====
=====

NiCoP H*+OH*

Title CoNiP(0\0\2)

Lattice type P

Space group name P 1

Space group number 1

Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
9.95430	11.49420	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 2860.417794 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1	Co Co1	0.00000	0.36922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
2	Co Co2	0.00000	0.86922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
3	Co Co3	0.13078	0.06539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
4	Co Co4	0.13078	0.56539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
5	Co Co5	0.36922	0.31539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
6	Co Co6	0.36922	0.81539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
7	Co Co7	0.50000	0.11922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
8	Co Co8	0.50000	0.61922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
9	Co Co9	0.63078	0.31539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10	Co Co10	0.63078	0.81539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11	Co Co11	0.86922	0.06539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12	Co Co12	0.86922	0.56539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13	Co Co13	0.00039	0.36951	0.19883	1.000	1.000	1a	1
14	Co Co14	0.00056	0.86907	0.19862	1.000	1.000	1a	1
15	Co Co15	0.13146	0.06352	0.19662	1.000	1.000	1a	1
16	Co Co16	0.13460	0.55997	0.20030	1.000	1.000	1a	1
17	Co Co17	0.36732	0.31729	0.19639	1.000	1.000	1a	1
18	Co Co18	0.36760	0.81083	0.19994	1.000	1.000	1a	1
19	Co Co19	0.49332	0.11972	0.20004	1.000	1.000	1a	1
20	Co Co20	0.50071	0.61988	0.19802	1.000	1.000	1a	1
21	Co Co21	0.62708	0.31757	0.19984	1.000	1.000	1a	1
22	Co Co22	0.63167	0.81551	0.19783	1.000	1.000	1a	1

23 Co	Co23	0.87085	0.06942	0.20119	1.000	1.000	1a	1
24 Co	Co24	0.87012	0.56516	0.19820	1.000	1.000	1a	1
25 Ni	Ni1	0.00000	0.19753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
26 Ni	Ni2	0.00000	0.69753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
27 Ni	Ni3	0.19753	0.40124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
28 Ni	Ni4	0.19753	0.90124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
29 Ni	Ni5	0.30247	0.15124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
30 Ni	Ni6	0.30247	0.65124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
31 Ni	Ni7	0.50000	0.44753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
32 Ni	Ni8	0.50000	0.94753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
33 Ni	Ni9	0.69753	0.15124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
34 Ni	Ni10	0.69753	0.65124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
35 Ni	Ni11	0.80247	0.40124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
36 Ni	Ni12	0.80247	0.90124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
37 Ni	Ni13	0.00000	0.19753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
38 Ni	Ni14	0.00000	0.69753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
39 Ni	Ni15	0.19753	0.40124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
40 Ni	Ni16	0.19753	0.90124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
41 Ni	Ni17	0.30247	0.15124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
42 Ni	Ni18	0.30247	0.65124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
43 Ni	Ni19	0.50000	0.44753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
44 Ni	Ni20	0.50000	0.94753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
45 Ni	Ni21	0.69753	0.15124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
46 Ni	Ni22	0.69753	0.65124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
47 Ni	Ni23	0.80247	0.40124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
48 Ni	Ni24	0.80247	0.90124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
49 Ni	Ni25	0.02401	0.19444	0.26392	1.000	1.000	1a	1
50 Ni	Ni26	0.00037	0.69281	0.26034	1.000	1.000	1a	1
51 Ni	Ni27	0.18517	0.38342	0.26774	1.000	1.000	1a	1
52 Ni	Ni28	0.19376	0.90198	0.26079	1.000	1.000	1a	1
53 Ni	Ni29	0.29037	0.16559	0.26274	1.000	1.000	1a	1
54 Ni	Ni30	0.31051	0.64881	0.26450	1.000	1.000	1a	1
55 Ni	Ni31	0.49433	0.44406	0.26381	1.000	1.000	1a	1
56 Ni	Ni32	0.50090	0.94204	0.26028	1.000	1.000	1a	1
57 Ni	Ni33	0.68805	0.15383	0.26099	1.000	1.000	1a	1
58 Ni	Ni34	0.69656	0.65233	0.26009	1.000	1.000	1a	1
59 Ni	Ni35	0.80499	0.40510	0.26102	1.000	1.000	1a	1
60 Ni	Ni36	0.80657	0.90093	0.26001	1.000	1.000	1a	1
61 P	P1	0.00000	0.00000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
62 P	P2	0.00000	0.50000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
63 P	P3	0.50000	0.25000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
64 P	P4	0.50000	0.75000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
65 P	P5	0.16667	0.25000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
66 P	P6	0.16667	0.75000	0.06562	1.000	1.000	1a	1

67 P	P7	0.33333	0.00000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
68 P	P8	0.33333	0.50000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
69 P	P9	0.66667	0.00000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
70 P	P10	0.66667	0.50000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
71 P	P11	0.83333	0.25000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
72 P	P12	0.83333	0.75000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
73 P	P13	0.00000	0.00000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
74 P	P14	0.00000	0.50000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
75 P	P15	0.50000	0.25000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
76 P	P16	0.50000	0.75000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
77 P	P17	0.16580	0.24953	0.19468	1.000	1.000	1a	1
78 P	P18	0.16669	0.74676	0.20278	1.000	1.000	1a	1
79 P	P19	0.33207	-0.00228	0.20246	1.000	1.000	1a	1
80 P	P20	0.33605	0.50061	0.19437	1.000	1.000	1a	1
81 P	P21	0.66628	0.00225	0.20247	1.000	1.000	1a	1
82 P	P22	0.66663	0.50046	0.20219	1.000	1.000	1a	1
83 P	P23	0.83188	0.25216	0.20393	1.000	1.000	1a	1
84 P	P24	0.83361	0.75007	0.20006	1.000	1.000	1a	1
85 P	P25	0.00180	0.99877	0.26685	1.000	1.000	1a	1
86 P	P26	-0.00027	0.49783	0.26722	1.000	1.000	1a	1
87 P	P27	0.49386	0.24979	0.26673	1.000	1.000	1a	1
88 P	P28	0.50396	0.74981	0.26717	1.000	1.000	1a	1
89 O	O1	0.32947	0.49586	0.30760	1.000	1.000	1a	1
90 H	H1	0.33741	0.49880	0.34645	1.000	1.000	1a	1
91 H	H2	0.16510	0.24178	0.29964	1.000	1.000	1a	1

=====
 ===

Hydrogen adsorption process

CoP H*

=====
 ===

Title CoP(2\0\0)

Lattice type P
 Space group name P 1
 Space group number 1
 Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
10.05150	11.00530	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 2765.494303 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1	Co Co1	0.24946	0.34874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
2	Co Co2	0.24946	0.84874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
3	Co Co3	0.49946	0.40126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
4	Co Co4	0.49946	0.90126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
5	Co Co5	0.74946	0.34874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
6	Co Co6	0.74946	0.84874	0.00000	1.000	1.000	1a	1
7	Co Co7	0.99946	0.40126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
8	Co Co8	0.99946	0.90126	0.00000	1.000	1.000	1a	1
9	Co Co9	0.00054	0.09874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10	Co Co10	0.00054	0.59874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11	Co Co11	0.25054	0.15126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12	Co Co12	0.25054	0.65126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13	Co Co13	0.50054	0.09874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
14	Co Co14	0.50054	0.59874	0.06562	1.000	1.000	1a	1
15	Co Co15	0.75054	0.15126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
16	Co Co16	0.75054	0.65126	0.06562	1.000	1.000	1a	1
17	Co Co17	0.24946	0.34874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
18	Co Co18	0.24946	0.84874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
19	Co Co19	0.49946	0.40126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
20	Co Co20	0.49946	0.90126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
21	Co Co21	0.74946	0.34874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
22	Co Co22	0.74946	0.84874	0.13125	1.000	1.000	1a	1
23	Co Co23	0.99946	0.40126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
24	Co Co24	0.99946	0.90126	0.13125	1.000	1.000	1a	1
25	Co Co25	0.99782	0.10244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
26	Co Co26	0.99782	0.60244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
27	Co Co27	0.24781	0.14756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
28	Co Co28	0.24781	0.64756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
29	Co Co29	0.49782	0.10244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
30	Co Co30	0.49782	0.60244	0.19589	1.000	1.000	1a	1
31	Co Co31	0.74782	0.14756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
32	Co Co32	0.74782	0.64756	0.19589	1.000	1.000	1a	1
33	Co Co33	0.25209	0.34756	0.25116	1.000	1.000	1a	1
34	Co Co34	0.25209	0.84756	0.25116	1.000	1.000	1a	1
35	Co Co35	0.50209	0.40244	0.25116	1.000	1.000	1a	1
36	Co Co36	0.50209	0.90244	0.25116	1.000	1.000	1a	1
37	Co Co37	0.75209	0.34756	0.25116	1.000	1.000	1a	1
38	Co Co38	0.75209	0.84756	0.25116	1.000	1.000	1a	1

39 Co	Co39	0.00209	0.40244	0.25116	1.000	1.000	1a	1
40 Co	Co40	0.00209	0.90244	0.25116	1.000	1.000	1a	1
41 P	P1	0.09583	0.20919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
42 P	P2	0.09583	0.70919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
43 P	P3	0.34583	0.04081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
44 P	P4	0.34583	0.54081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
45 P	P5	0.59583	0.20919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
46 P	P6	0.59583	0.70919	0.00000	1.000	1.000	1a	1
47 P	P7	0.84583	0.04081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
48 P	P8	0.84583	0.54081	0.00000	1.000	1.000	1a	1
49 P	P9	0.15417	0.45919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
50 P	P10	0.15417	0.95919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
51 P	P11	0.40417	0.29081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
52 P	P12	0.40417	0.79081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
53 P	P13	0.65417	0.45919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
54 P	P14	0.65417	0.95919	0.06562	1.000	1.000	1a	1
55 P	P15	0.90417	0.29081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
56 P	P16	0.90417	0.79081	0.06562	1.000	1.000	1a	1
57 P	P17	0.09583	0.20919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
58 P	P18	0.09583	0.70919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
59 P	P19	0.34583	0.04081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
60 P	P20	0.34583	0.54081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
61 P	P21	0.59583	0.20919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
62 P	P22	0.59583	0.70919	0.13125	1.000	1.000	1a	1
63 P	P23	0.84583	0.04081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
64 P	P24	0.84583	0.54081	0.13125	1.000	1.000	1a	1
65 P	P25	0.15513	0.46395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
66 P	P26	0.15513	0.96395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
67 P	P27	0.40513	0.28605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
68 P	P28	0.40513	0.78605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
69 P	P29	0.65513	0.46395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
70 P	P30	0.65513	0.96395	0.19702	1.000	1.000	1a	1
71 P	P31	0.90513	0.28605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
72 P	P32	0.90513	0.78605	0.19702	1.000	1.000	1a	1
73 P	P33	0.08905	0.22099	0.26578	1.000	1.000	1a	1
74 P	P34	0.08905	0.72099	0.26578	1.000	1.000	1a	1
75 P	P35	0.33904	0.02901	0.26578	1.000	1.000	1a	1
76 P	P36	0.33904	0.52901	0.26578	1.000	1.000	1a	1
77 P	P37	0.58904	0.22099	0.26578	1.000	1.000	1a	1
78 P	P38	0.58904	0.72099	0.26578	1.000	1.000	1a	1
79 P	P39	0.83904	0.02901	0.26578	1.000	1.000	1a	1
80 P	P40	0.83904	0.52901	0.26578	1.000	1.000	1a	1
81 H	H1	0.39453	0.33355	0.28970	1.000	1.000	1a	1

=====
NiCoP-CoP H*
=====

=====
Title opt-Test

Lattice type P
Space group name P 1
Space group number 1
Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
20.00560	11.24700	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 5625.074443 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1	Co Co1	0.00675	0.40905	0.00000	1.000	1.000	1a	1
2	Co Co2	0.00675	0.90905	0.00000	1.000	1.000	1a	1
3	Co Co3	0.12814	0.34862	0.00000	1.000	1.000	1a	1
4	Co Co4	0.12814	0.84862	0.00000	1.000	1.000	1a	1
5	Co Co5	0.25523	0.39733	0.00000	1.000	1.000	1a	1
6	Co Co6	0.25523	0.89733	0.00000	1.000	1.000	1a	1
7	Co Co7	0.38277	0.35161	0.00000	1.000	1.000	1a	1
8	Co Co8	0.38277	0.85161	0.00000	1.000	1.000	1a	1
9	Co Co9	0.01686	0.09208	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10	Co Co10	0.01686	0.59208	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11	Co Co11	0.13517	0.14703	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12	Co Co12	0.13517	0.64703	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13	Co Co13	0.25705	0.10125	0.06562	1.000	1.000	1a	1
14	Co Co14	0.25705	0.60125	0.06562	1.000	1.000	1a	1
15	Co Co15	0.37959	0.14467	0.06562	1.000	1.000	1a	1
16	Co Co16	0.37959	0.64467	0.06562	1.000	1.000	1a	1
17	Co Co17	0.50387	0.08464	0.06562	1.000	1.000	1a	1
18	Co Co18	0.50387	0.58464	0.06562	1.000	1.000	1a	1
19	Co Co19	0.58720	0.27888	0.06562	1.000	1.000	1a	1
20	Co Co20	0.58720	0.77888	0.06562	1.000	1.000	1a	1
21	Co Co21	0.70394	0.02381	0.06562	1.000	1.000	1a	1
22	Co Co22	0.70394	0.52381	0.06562	1.000	1.000	1a	1

23 Co	Co23	0.77258	0.32820	0.06562	1.000	1.000	1a	1
24 Co	Co24	0.77258	0.82820	0.06562	1.000	1.000	1a	1
25 Co	Co25	0.83653	0.02678	0.06562	1.000	1.000	1a	1
26 Co	Co26	0.83653	0.52678	0.06562	1.000	1.000	1a	1
27 Co	Co27	0.95638	0.27536	0.06562	1.000	1.000	1a	1
28 Co	Co28	0.95638	0.77536	0.06562	1.000	1.000	1a	1
29 Co	Co29	0.01381	0.40341	0.13125	1.000	1.000	1a	1
30 Co	Co30	0.01381	0.90341	0.13125	1.000	1.000	1a	1
31 Co	Co31	0.13239	0.34729	0.13125	1.000	1.000	1a	1
32 Co	Co32	0.13239	0.84729	0.13125	1.000	1.000	1a	1
33 Co	Co33	0.25310	0.39909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
34 Co	Co34	0.25310	0.89909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
35 Co	Co35	0.37623	0.35070	0.13125	1.000	1.000	1a	1
36 Co	Co36	0.37623	0.85070	0.13125	1.000	1.000	1a	1
37 Co	Co37	0.01511	0.09433	0.19658	1.000	1.000	1a	1
38 Co	Co38	0.01511	0.59437	0.19658	1.000	1.000	1a	1
39 Co	Co39	0.13329	0.14019	0.19716	1.000	1.000	1a	1
40 Co	Co40	0.13329	0.64020	0.19715	1.000	1.000	1a	1
41 Co	Co41	0.25546	0.10285	0.19867	1.000	1.000	1a	1
42 Co	Co42	0.25546	0.60285	0.19867	1.000	1.000	1a	1
43 Co	Co43	0.37818	0.14654	0.19774	1.000	1.000	1a	1
44 Co	Co44	0.37818	0.64654	0.19774	1.000	1.000	1a	1
45 Co	Co45	0.50416	0.09552	0.20277	1.000	1.000	1a	1
46 Co	Co46	0.50416	0.59552	0.20277	1.000	1.000	1a	1
47 Co	Co47	0.58422	0.27676	0.19929	1.000	1.000	1a	1
48 Co	Co48	0.58422	0.77676	0.19929	1.000	1.000	1a	1
49 Co	Co49	0.70382	0.01977	0.19876	1.000	1.000	1a	1
50 Co	Co50	0.70382	0.51977	0.19876	1.000	1.000	1a	1
51 Co	Co51	0.77157	0.32765	0.19826	1.000	1.000	1a	1
52 Co	Co52	0.77157	0.82764	0.19827	1.000	1.000	1a	1
53 Co	Co53	0.83376	0.02583	0.20071	1.000	1.000	1a	1
54 Co	Co54	0.83377	0.52583	0.20071	1.000	1.000	1a	1
55 Co	Co55	0.95558	0.27964	0.19777	1.000	1.000	1a	1
56 Co	Co56	0.95558	0.77967	0.19778	1.000	1.000	1a	1
57 Co	Co57	0.00828	0.41550	0.26112	1.000	1.000	1a	1
58 Co	Co58	0.00830	0.91545	0.26112	1.000	1.000	1a	1
59 Co	Co59	0.12783	0.33960	0.25401	1.000	1.000	1a	1
60 Co	Co60	0.12785	0.83959	0.25401	1.000	1.000	1a	1
61 Co	Co61	0.25537	0.39830	0.25065	1.000	1.000	1a	1
62 Co	Co62	0.25538	0.89831	0.25065	1.000	1.000	1a	1
63 Co	Co63	0.38147	0.35073	0.25276	1.000	1.000	1a	1
64 Co	Co64	0.38147	0.85073	0.25277	1.000	1.000	1a	1
65 Ni	Ni1	0.51052	0.40283	0.00000	1.000	1.000	1a	1
66 Ni	Ni2	0.51052	0.90283	0.00000	1.000	1.000	1a	1

67 Ni	Ni3	0.62146	0.10806	0.00000	1.000	1.000	1a	1
68 Ni	Ni4	0.62146	0.60806	0.00000	1.000	1.000	1a	1
69 Ni	Ni5	0.67694	0.35784	0.00000	1.000	1.000	1a	1
70 Ni	Ni6	0.67694	0.85784	0.00000	1.000	1.000	1a	1
71 Ni	Ni7	0.76923	0.15455	0.00000	1.000	1.000	1a	1
72 Ni	Ni8	0.76923	0.65455	0.00000	1.000	1.000	1a	1
73 Ni	Ni9	0.86953	0.35916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
74 Ni	Ni10	0.86953	0.85916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
75 Ni	Ni11	0.93046	0.11273	0.00000	1.000	1.000	1a	1
76 Ni	Ni12	0.93046	0.61273	0.00000	1.000	1.000	1a	1
77 Ni	Ni13	0.50670	0.39909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
78 Ni	Ni14	0.50670	0.89909	0.13125	1.000	1.000	1a	1
79 Ni	Ni15	0.62370	0.10922	0.13125	1.000	1.000	1a	1
80 Ni	Ni16	0.62370	0.60922	0.13125	1.000	1.000	1a	1
81 Ni	Ni17	0.67014	0.36192	0.13125	1.000	1.000	1a	1
82 Ni	Ni18	0.67014	0.86192	0.13125	1.000	1.000	1a	1
83 Ni	Ni19	0.77115	0.15432	0.13125	1.000	1.000	1a	1
84 Ni	Ni20	0.77115	0.65432	0.13125	1.000	1.000	1a	1
85 Ni	Ni21	0.87340	0.36151	0.13125	1.000	1.000	1a	1
86 Ni	Ni22	0.87340	0.86151	0.13125	1.000	1.000	1a	1
87 Ni	Ni23	0.91952	0.11549	0.13125	1.000	1.000	1a	1
88 Ni	Ni24	0.91952	0.61549	0.13125	1.000	1.000	1a	1
89 Ni	Ni25	0.50763	0.40288	0.25357	1.000	1.000	1a	1
90 Ni	Ni26	0.50763	0.90288	0.25357	1.000	1.000	1a	1
91 Ni	Ni27	0.62584	0.11460	0.26340	1.000	1.000	1a	1
92 Ni	Ni28	0.62584	0.61460	0.26340	1.000	1.000	1a	1
93 Ni	Ni29	0.67145	0.35602	0.26233	1.000	1.000	1a	1
94 Ni	Ni30	0.67145	0.85602	0.26233	1.000	1.000	1a	1
95 Ni	Ni31	0.76816	0.15375	0.26327	1.000	1.000	1a	1
96 Ni	Ni32	0.76816	0.65375	0.26327	1.000	1.000	1a	1
97 Ni	Ni33	0.86889	0.36202	0.26253	1.000	1.000	1a	1
98 Ni	Ni34	0.86887	0.86202	0.26254	1.000	1.000	1a	1
99 Ni	Ni35	0.92761	0.12110	0.26343	1.000	1.000	1a	1
100 Ni	Ni36	0.92761	0.62107	0.26343	1.000	1.000	1a	1
101 P	P1	0.03409	0.21848	0.00000	1.000	1.000	1a	1
102 P	P2	0.03409	0.71848	0.00000	1.000	1.000	1a	1
103 P	P3	0.17390	0.02890	0.00000	1.000	1.000	1a	1
104 P	P4	0.17390	0.52890	0.00000	1.000	1.000	1a	1
105 P	P5	0.29813	0.21916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
106 P	P6	0.29813	0.71916	0.00000	1.000	1.000	1a	1
107 P	P7	0.42362	0.03145	0.00000	1.000	1.000	1a	1
108 P	P8	0.42362	0.53145	0.00000	1.000	1.000	1a	1
109 P	P9	0.52912	0.20886	0.00000	1.000	1.000	1a	1
110 P	P10	0.52912	0.70886	0.00000	1.000	1.000	1a	1

111 P	P11	0.77143	0.45725	0.00000	1.000	1.000	1a	1
112 P	P12	0.77143	0.95725	0.00000	1.000	1.000	1a	1
113 P	P13	0.08693	0.45321	0.06562	1.000	1.000	1a	1
114 P	P14	0.08693	0.95321	0.06562	1.000	1.000	1a	1
115 P	P15	0.20538	0.29402	0.06562	1.000	1.000	1a	1
116 P	P16	0.20538	0.79402	0.06562	1.000	1.000	1a	1
117 P	P17	0.32908	0.45438	0.06562	1.000	1.000	1a	1
118 P	P18	0.32908	0.95438	0.06562	1.000	1.000	1a	1
119 P	P19	0.44768	0.29725	0.06562	1.000	1.000	1a	1
120 P	P20	0.44768	0.79725	0.06562	1.000	1.000	1a	1
121 P	P21	0.59766	0.46715	0.06562	1.000	1.000	1a	1
122 P	P22	0.59766	0.96715	0.06562	1.000	1.000	1a	1
123 P	P23	0.68981	0.21162	0.06562	1.000	1.000	1a	1
124 P	P24	0.68981	0.71162	0.06562	1.000	1.000	1a	1
125 P	P25	0.85529	0.21141	0.06562	1.000	1.000	1a	1
126 P	P26	0.85529	0.71141	0.06562	1.000	1.000	1a	1
127 P	P27	0.93738	0.46256	0.06562	1.000	1.000	1a	1
128 P	P28	0.93738	0.96256	0.06562	1.000	1.000	1a	1
129 P	P29	0.03746	0.21394	0.13125	1.000	1.000	1a	1
130 P	P30	0.03746	0.71394	0.13125	1.000	1.000	1a	1
131 P	P31	0.17801	0.04371	0.13125	1.000	1.000	1a	1
132 P	P32	0.17801	0.54371	0.13125	1.000	1.000	1a	1
133 P	P33	0.30152	0.20524	0.13125	1.000	1.000	1a	1
134 P	P34	0.30152	0.70524	0.13125	1.000	1.000	1a	1
135 P	P35	0.42559	0.04086	0.13125	1.000	1.000	1a	1
136 P	P36	0.42559	0.54086	0.13125	1.000	1.000	1a	1
137 P	P37	0.53204	0.20422	0.13125	1.000	1.000	1a	1
138 P	P38	0.53204	0.70422	0.13125	1.000	1.000	1a	1
139 P	P39	0.77155	0.45710	0.13125	1.000	1.000	1a	1
140 P	P40	0.77155	0.95710	0.13125	1.000	1.000	1a	1
141 P	P41	0.08604	0.45685	0.19766	1.000	1.000	1a	1
142 P	P42	0.08603	0.95684	0.19767	1.000	1.000	1a	1
143 P	P43	0.20575	0.28346	0.19697	1.000	1.000	1a	1
144 P	P44	0.20574	0.78347	0.19697	1.000	1.000	1a	1
145 P	P45	0.33229	0.46416	0.19802	1.000	1.000	1a	1
146 P	P46	0.33229	0.96416	0.19802	1.000	1.000	1a	1
147 P	P47	0.45490	0.28309	0.19958	1.000	1.000	1a	1
148 P	P48	0.45490	0.78309	0.19958	1.000	1.000	1a	1
149 P	P49	0.59843	0.46755	0.20590	1.000	1.000	1a	1
150 P	P50	0.59843	0.96755	0.20590	1.000	1.000	1a	1
151 P	P51	0.68844	0.20928	0.20162	1.000	1.000	1a	1
152 P	P52	0.68844	0.70928	0.20161	1.000	1.000	1a	1
153 P	P53	0.85555	0.21052	0.20364	1.000	1.000	1a	1
154 P	P54	0.85555	0.71053	0.20364	1.000	1.000	1a	1

155 P	P55	0.93437	0.46642	0.20088	1.000	1.000	1a	1
156 P	P56	0.93438	0.96641	0.20090	1.000	1.000	1a	1
157 P	P57	0.02962	0.22356	0.26237	1.000	1.000	1a	1
158 P	P58	0.02963	0.72351	0.26239	1.000	1.000	1a	1
159 P	P59	0.17288	0.02116	0.26330	1.000	1.000	1a	1
160 P	P60	0.17288	0.52117	0.26330	1.000	1.000	1a	1
161 P	P61	0.29991	0.22199	0.26551	1.000	1.000	1a	1
162 P	P62	0.29991	0.72199	0.26551	1.000	1.000	1a	1
163 P	P63	0.42314	0.03063	0.26741	1.000	1.000	1a	1
164 P	P64	0.42314	0.53063	0.26741	1.000	1.000	1a	1
165 P	P65	0.54108	0.22286	0.28026	1.000	1.000	1a	1
166 P	P66	0.54108	0.72286	0.28026	1.000	1.000	1a	1
167 P	P67	0.76882	0.45456	0.26911	1.000	1.000	1a	1
168 P	P68	0.76881	0.95456	0.26912	1.000	1.000	1a	1
169 H	H1	0.64015	0.49295	0.29866	1.000	1.000	1a	1

=====
 ===

NiCoP H*

=====
 ===

Title CoNiP(0\0\2)

Lattice type P
 Space group name P 1
 Space group number 1
 Setting number 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
9.95430	11.49420	25.00000	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 2860.417794 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1 Co	Co1	0.00000	0.36922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
2 Co	Co2	0.00000	0.86922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
3 Co	Co3	0.13078	0.06539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
4 Co	Co4	0.13078	0.56539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
5 Co	Co5	0.36922	0.31539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
6 Co	Co6	0.36922	0.81539	0.06562	1.000	1.000	1a	1

7 Co	Co7	0.50000	0.11922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
8 Co	Co8	0.50000	0.61922	0.06562	1.000	1.000	1a	1
9 Co	Co9	0.63078	0.31539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
10 Co	Co10	0.63078	0.81539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
11 Co	Co11	0.86922	0.06539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
12 Co	Co12	0.86922	0.56539	0.06562	1.000	1.000	1a	1
13 Co	Co13	0.00000	0.36990	0.19845	1.000	1.000	1a	1
14 Co	Co14	0.00000	0.86990	0.19845	1.000	1.000	1a	1
15 Co	Co15	0.13094	0.06550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
16 Co	Co16	0.13094	0.56550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
17 Co	Co17	0.36906	0.31550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
18 Co	Co18	0.36906	0.81550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
19 Co	Co19	0.50000	0.11990	0.19845	1.000	1.000	1a	1
20 Co	Co20	0.50000	0.61990	0.19845	1.000	1.000	1a	1
21 Co	Co21	0.63094	0.31550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
22 Co	Co22	0.63094	0.81550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
23 Co	Co23	0.86906	0.06550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
24 Co	Co24	0.86906	0.56550	0.19827	1.000	1.000	1a	1
25 Ni	Ni1	0.00000	0.19753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
26 Ni	Ni2	0.00000	0.69753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
27 Ni	Ni3	0.19753	0.40124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
28 Ni	Ni4	0.19753	0.90124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
29 Ni	Ni5	0.30247	0.15124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
30 Ni	Ni6	0.30247	0.65124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
31 Ni	Ni7	0.50000	0.44753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
32 Ni	Ni8	0.50000	0.94753	0.00000	1.000	1.000	1a	1
33 Ni	Ni9	0.69753	0.15124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
34 Ni	Ni10	0.69753	0.65124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
35 Ni	Ni11	0.80247	0.40124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
36 Ni	Ni12	0.80247	0.90124	0.00000	1.000	1.000	1a	1
37 Ni	Ni13	0.00000	0.19753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
38 Ni	Ni14	0.00000	0.69753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
39 Ni	Ni15	0.19753	0.40124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
40 Ni	Ni16	0.19753	0.90124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
41 Ni	Ni17	0.30247	0.15124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
42 Ni	Ni18	0.30247	0.65124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
43 Ni	Ni19	0.50000	0.44753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
44 Ni	Ni20	0.50000	0.94753	0.13125	1.000	1.000	1a	1
45 Ni	Ni21	0.69753	0.15124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
46 Ni	Ni22	0.69753	0.65124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
47 Ni	Ni23	0.80247	0.40124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
48 Ni	Ni24	0.80247	0.90124	0.13125	1.000	1.000	1a	1
49 Ni	Ni25	0.00000	0.19434	0.26006	1.000	1.000	1a	1
50 Ni	Ni26	0.00000	0.69434	0.26006	1.000	1.000	1a	1

51 Ni	Ni27	0.19450	0.40217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
52 Ni	Ni28	0.19450	0.90217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
53 Ni	Ni29	0.30550	0.15217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
54 Ni	Ni30	0.30550	0.65217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
55 Ni	Ni31	0.50000	0.44434	0.26006	1.000	1.000	1a	1
56 Ni	Ni32	0.50000	0.94434	0.26006	1.000	1.000	1a	1
57 Ni	Ni33	0.69450	0.15217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
58 Ni	Ni34	0.69450	0.65217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
59 Ni	Ni35	0.80550	0.40217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
60 Ni	Ni36	0.80550	0.90217	0.26022	1.000	1.000	1a	1
61 P	P1	0.00000	0.00000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
62 P	P2	0.00000	0.50000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
63 P	P3	0.50000	0.25000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
64 P	P4	0.50000	0.75000	0.00000	1.000	1.000	1a	1
65 P	P5	0.16667	0.25000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
66 P	P6	0.16667	0.75000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
67 P	P7	0.33333	0.00000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
68 P	P8	0.33333	0.50000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
69 P	P9	0.66667	0.00000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
70 P	P10	0.66667	0.50000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
71 P	P11	0.83333	0.25000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
72 P	P12	0.83333	0.75000	0.06562	1.000	1.000	1a	1
73 P	P13	0.00000	0.00000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
74 P	P14	0.00000	0.50000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
75 P	P15	0.50000	0.25000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
76 P	P16	0.50000	0.75000	0.13125	1.000	1.000	1a	1
77 P	P17	0.16696	0.25025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
78 P	P18	0.16696	0.75025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
79 P	P19	0.33303	0.00025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
80 P	P20	0.33303	0.50025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
81 P	P21	0.66697	0.00025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
82 P	P22	0.66697	0.50025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
83 P	P23	0.83303	0.25025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
84 P	P24	0.83303	0.75025	0.20057	1.000	1.000	1a	1
85 P	P25	0.00000	0.99926	0.26667	1.000	1.000	1a	1
86 P	P26	0.00000	0.49926	0.26667	1.000	1.000	1a	1
87 P	P27	0.50000	0.24926	0.26667	1.000	1.000	1a	1
88 P	P28	0.50000	0.74926	0.26667	1.000	1.000	1a	1
89 H	H1	0.38694	0.52281	0.29488	1.000	1.000	1a	1

=====
=====