

Supporting Information

First-principle Study on Electrocatalytic CO₂ Reduction by 2D

TM₃(HATNA)₂: Products and Mechanism

Xin Wang^a, Beibei An^c, Hui Zhao^a, Huali Jia^a, Like Wang^a, Jie Li^a, Yongliang

Ban^a, Xiaoming Zhu^{b*}

^a*School of Chemistry and Chemical Engineering, Zhoukou Normal University, Zhoukou 466000,
PR China*

^b*School of Mathematics and Statistics, Zhoukou Normal University, Henan Province 466001,
China*

^c*College of Chemistry and Molecular Sciences, Henan University, Kaifeng, Henan 475004,
PRChina*

*Corresponding authors E-mail : zxm20111027@163.com (X. Zhu).

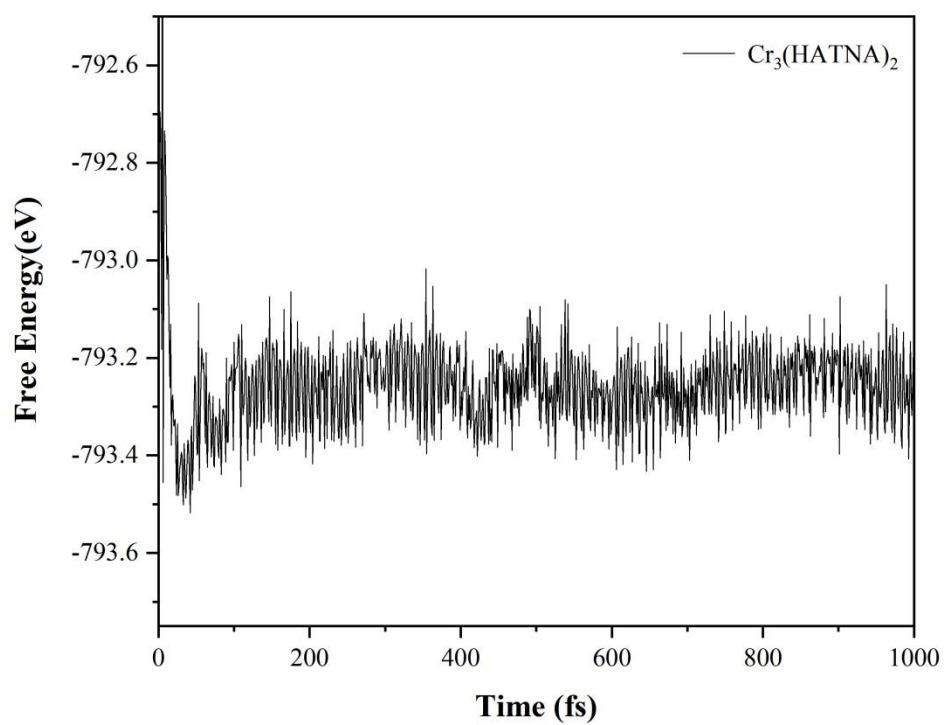


Figure S1. The variation of energy over time in the molecular dynamics simulation of $\text{Cr}_3(\text{HATNA})_2$.

Table S1. The atomic coordinate information of the catalyst substrate and adsorbed intermediates.

Ag ₃ (HATNA) ₂	coordinates			Co ₃ (HATNA) ₂	coordinates		
	x	y	z		x	y	z
O1	0.05681	0.57400	0.50000	O1	0.05162	0.56869	0.50000
O2	0.94319	0.42600	0.50000	O2	0.94838	0.43131	0.50000
O3	0.42600	0.48281	0.50000	O3	0.43131	0.48292	0.50000
O4	0.57400	0.51719	0.50000	O4	0.56869	0.51708	0.50000
O5	0.51719	0.94319	0.50000	O5	0.51708	0.94838	0.50000
O6	0.48281	0.05681	0.50000	O6	0.48292	0.05162	0.50000
O7	0.57400	0.05681	0.50000	O7	0.56869	0.05162	0.50000
O8	0.42600	0.94319	0.50000	O8	0.43131	0.94838	0.50000
O9	0.48281	0.42600	0.50000	O9	0.48292	0.43131	0.50000
O10	0.51719	0.57400	0.50000	O10	0.51708	0.56869	0.50000
O11	0.94319	0.51719	0.50000	O11	0.94838	0.51708	0.50000
O12	0.05681	0.48281	0.50000	O12	0.05162	0.48292	0.50000
C1	0.38207	0.71554	0.50000	C1	0.38275	0.71632	0.50000
C2	0.61793	0.28446	0.50000	C2	0.61725	0.28368	0.50000
C3	0.28446	0.66654	0.50000	C3	0.28368	0.66643	0.50000
C4	0.71554	0.33346	0.50000	C4	0.71632	0.33357	0.50000
C5	0.33346	0.61793	0.50000	C5	0.33357	0.61725	0.50000
C6	0.66654	0.38207	0.50000	C6	0.66643	0.38275	0.50000
C7	0.71554	0.38207	0.50000	C7	0.71632	0.38275	0.50000
C8	0.28446	0.61793	0.50000	C8	0.28368	0.61725	0.50000

C9	0.66654	0.28446	0.50000	C9	0.66643	0.28368	0.50000
C10	0.33346	0.71554	0.50000	C10	0.33357	0.71632	0.50000
C11	0.61793	0.33346	0.50000	C11	0.61725	0.33357	0.50000
C12	0.38207	0.66654	0.50000	C12	0.38275	0.66643	0.50000
C13	0.19566	0.57325	0.50000	C13	0.19349	0.57188	0.50000
C14	0.80434	0.42675	0.50000	C14	0.80651	0.42812	0.50000
C15	0.42675	0.62242	0.50000	C15	0.42812	0.62161	0.50000
C16	0.57325	0.37758	0.50000	C16	0.57188	0.37839	0.50000
C17	0.37758	0.80434	0.50000	C17	0.37839	0.80651	0.50000
C18	0.62242	0.19566	0.50000	C18	0.62161	0.19349	0.50000
C19	0.57325	0.19566	0.50000	C19	0.57188	0.19349	0.50000
C20	0.42675	0.80434	0.50000	C20	0.42812	0.80651	0.50000
C21	0.62242	0.42675	0.50000	C21	0.62161	0.42812	0.50000
C22	0.37758	0.57325	0.50000	C22	0.37839	0.57188	0.50000
C23	0.80434	0.37758	0.50000	C23	0.80651	0.37839	0.50000
C24	0.19566	0.62242	0.50000	C24	0.19349	0.62161	0.50000
C25	0.14857	0.52570	0.50000	C25	0.14573	0.52359	0.50000
C26	0.85143	0.47430	0.50000	C26	0.85427	0.47641	0.50000
C27	0.47430	0.62287	0.50000	C27	0.47641	0.62214	0.50000
C28	0.52570	0.37713	0.50000	C28	0.52359	0.37786	0.50000
C29	0.37713	0.85143	0.50000	C29	0.37786	0.85427	0.50000
C30	0.62287	0.14857	0.50000	C30	0.62214	0.14573	0.50000
C31	0.52570	0.14857	0.50000	C31	0.52359	0.14573	0.50000

C32	0.47430	0.85143	0.50000	C32	0.47641	0.85427	0.50000
C33	0.62287	0.47430	0.50000	C33	0.62214	0.47641	0.50000
C34	0.37713	0.52570	0.50000	C34	0.37786	0.52359	0.50000
C35	0.85143	0.37713	0.50000	C35	0.85427	0.37786	0.50000
C36	0.14857	0.62287	0.50000	C36	0.14573	0.62214	0.50000
C37	0.10257	0.52684	0.50000	C37	0.09920	0.52492	0.50000
C38	0.89743	0.47316	0.50000	C38	0.90080	0.47508	0.50000
C39	0.47316	0.57572	0.50000	C39	0.47508	0.57429	0.50000
C40	0.52684	0.42428	0.50000	C40	0.52492	0.42571	0.50000
C41	0.42428	0.89743	0.50000	C41	0.42571	0.90080	0.50000
C42	0.57572	0.10257	0.50000	C42	0.57429	0.09920	0.50000
C43	0.52684	0.10257	0.50000	C43	0.52492	0.09920	0.50000
C44	0.47316	0.89743	0.50000	C44	0.47508	0.90080	0.50000
C45	0.57572	0.47316	0.50000	C45	0.57429	0.47508	0.50000
C46	0.42428	0.52684	0.50000	C46	0.42571	0.52492	0.50000
C47	0.89743	0.42428	0.50000	C47	0.90080	0.42571	0.50000
C48	0.10257	0.57572	0.50000	C48	0.09920	0.57429	0.50000
H1	0.14836	0.48885	0.50000	H1	0.14597	0.48665	0.50000
H2	0.85164	0.51115	0.50000	H2	0.85403	0.51335	0.50000
H3	0.51115	0.65951	0.50000	H3	0.51335	0.65931	0.50000
H4	0.48885	0.34049	0.50000	H4	0.48665	0.34069	0.50000
H5	0.34049	0.85164	0.50000	H5	0.34069	0.85403	0.50000
H6	0.65951	0.14836	0.50000	H6	0.65931	0.14597	0.50000

H7	0.48885	0.14836	0.50000	H7	0.48665	0.14597	0.50000
H8	0.51115	0.85164	0.50000	H8	0.51335	0.85403	0.50000
H9	0.65951	0.51115	0.50000	H9	0.65931	0.51335	0.50000
H10	0.34049	0.48885	0.50000	H10	0.34069	0.48665	0.50000
H11	0.85164	0.34049	0.50000	H11	0.85403	0.34069	0.50000
H12	0.14836	0.65951	0.50000	H12	0.14597	0.65931	0.50000
N1	0.24056	0.57231	0.50000	N1	0.23917	0.57133	0.50000
N2	0.75944	0.42769	0.50000	N2	0.76083	0.42867	0.50000
N3	0.42769	0.66826	0.50000	N3	0.42867	0.66784	0.50000
N4	0.57231	0.33174	0.50000	N4	0.57133	0.33216	0.50000
N5	0.33174	0.75944	0.50000	N5	0.33216	0.76083	0.50000
N6	0.66826	0.24056	0.50000	N6	0.66784	0.23917	0.50000
N7	0.57231	0.24056	0.50000	N7	0.57133	0.23917	0.50000
N8	0.42769	0.75944	0.50000	N8	0.42867	0.76083	0.50000
N9	0.66826	0.42769	0.50000	N9	0.66784	0.42867	0.50000
N10	0.33174	0.57231	0.50000	N10	0.33216	0.57133	0.50000
N11	0.75944	0.33174	0.50000	N11	0.76083	0.33216	0.50000
N12	0.24056	0.66826	0.50000	N12	0.23917	0.66784	0.50000
Ag1	0.50000	0.50000	0.50000	Co1	0.50000	0.50000	0.50000
Ag2	0.50000	0.00000	0.50000	Co2	0.50000	0.00000	0.50000
Ag3	0.00000	0.50000	0.50000	Co3	0.00000	0.50000	0.50000
Cr ₃ (HATNA) ₂ coordinates				Cu ₃ (HATNA) ₂ coordinates			

	x	y	z		x	y	z
O1	0.05424	0.56988	0.50000	O1	0.05535	0.57180	0.50000
O2	0.94576	0.43012	0.50000	O2	0.94465	0.42820	0.50000
O3	0.43012	0.48435	0.50000	O3	0.42820	0.48355	0.50000
O4	0.56988	0.51565	0.50000	O4	0.57180	0.51645	0.50000
O5	0.51565	0.94576	0.50000	O5	0.51645	0.94465	0.50000
O6	0.48435	0.05424	0.50000	O6	0.48355	0.05535	0.50000
O7	0.56988	0.05424	0.50000	O7	0.57180	0.05535	0.50000
O8	0.43012	0.94576	0.50000	O8	0.42820	0.94465	0.50000
O9	0.48435	0.43012	0.50000	O9	0.48355	0.42820	0.50000
O10	0.51565	0.56988	0.50000	O10	0.51645	0.57180	0.50000
O11	0.94576	0.51565	0.50000	O11	0.94465	0.51645	0.50000
O12	0.05424	0.48435	0.50000	O12	0.05535	0.48355	0.50000
C1	0.38204	0.71567	0.50000	C1	0.38246	0.71585	0.50000
C2	0.61796	0.28433	0.50000	C2	0.61754	0.28415	0.50000
C3	0.28433	0.66637	0.50000	C3	0.28415	0.66662	0.50000
C4	0.71567	0.33363	0.50000	C4	0.71585	0.33338	0.50000
C5	0.33363	0.61796	0.50000	C5	0.33338	0.61754	0.50000
C6	0.66637	0.38204	0.50000	C6	0.66662	0.38246	0.50000
C7	0.71567	0.38204	0.50000	C7	0.71585	0.38246	0.50000
C8	0.28433	0.61796	0.50000	C8	0.28415	0.61754	0.50000
C9	0.66637	0.28433	0.50000	C9	0.66662	0.28415	0.50000
C10	0.33363	0.71567	0.50000	C10	0.33338	0.71585	0.50000

C11	0.61796	0.33363	0.50000	C11	0.61754	0.33338	0.50000
C12	0.38204	0.66637	0.50000	C12	0.38246	0.66662	0.50000
C13	0.19521	0.57315	0.50000	C13	0.19471	0.57253	0.50000
C14	0.80479	0.42685	0.50000	C14	0.80529	0.42747	0.50000
C15	0.42685	0.62206	0.50000	C15	0.42747	0.62218	0.50000
C16	0.57315	0.37794	0.50000	C16	0.57253	0.37782	0.50000
C17	0.37794	0.80479	0.50000	C17	0.37782	0.80529	0.50000
C18	0.62206	0.19521	0.50000	C18	0.62218	0.19471	0.50000
C19	0.57315	0.19521	0.50000	C19	0.57253	0.19471	0.50000
C20	0.42685	0.80479	0.50000	C20	0.42747	0.80529	0.50000
C21	0.62206	0.42685	0.50000	C21	0.62218	0.42747	0.50000
C22	0.37794	0.57315	0.50000	C22	0.37782	0.57253	0.50000
C23	0.80479	0.37794	0.50000	C23	0.80529	0.37782	0.50000
C24	0.19521	0.62206	0.50000	C24	0.19471	0.62218	0.50000
C25	0.14749	0.52525	0.50000	C25	0.14780	0.52513	0.50000
C26	0.85251	0.47475	0.50000	C26	0.85220	0.47487	0.50000
C27	0.47475	0.62224	0.50000	C27	0.47487	0.62268	0.50000
C28	0.52525	0.37776	0.50000	C28	0.52513	0.37732	0.50000
C29	0.37776	0.85251	0.50000	C29	0.37732	0.85220	0.50000
C30	0.62224	0.14749	0.50000	C30	0.62268	0.14780	0.50000
C31	0.52525	0.14749	0.50000	C31	0.52513	0.14780	0.50000
C32	0.47475	0.85251	0.50000	C32	0.47487	0.85220	0.50000
C33	0.62224	0.47475	0.50000	C33	0.62268	0.47487	0.50000

C34	0.37776	0.52525	0.50000	C34	0.37732	0.52513	0.50000
C35	0.85251	0.37776	0.50000	C35	0.85220	0.37732	0.50000
C36	0.14749	0.62224	0.50000	C36	0.14780	0.62268	0.50000
C37	0.10151	0.52633	0.50000	C37	0.10068	0.52533	0.50000
C38	0.89849	0.47367	0.50000	C38	0.89932	0.47467	0.50000
C39	0.47367	0.57518	0.50000	C39	0.47467	0.57535	0.50000
C40	0.52633	0.42482	0.50000	C40	0.52533	0.42465	0.50000
C41	0.42482	0.89849	0.50000	C41	0.42465	0.89932	0.50000
C42	0.57518	0.10151	0.50000	C42	0.57535	0.10068	0.50000
C43	0.52633	0.10151	0.50000	C43	0.52533	0.10068	0.50000
C44	0.47367	0.89849	0.50000	C44	0.47467	0.89932	0.50000
C45	0.57518	0.47367	0.50000	C45	0.57535	0.47467	0.50000
C46	0.42482	0.52633	0.50000	C46	0.42465	0.52533	0.50000
C47	0.89849	0.42482	0.50000	C47	0.89932	0.42465	0.50000
C48	0.10151	0.57518	0.50000	C48	0.10068	0.57535	0.50000
H1	0.14757	0.48864	0.50000	H1	0.14802	0.48854	0.50000
H2	0.85243	0.51136	0.50000	H2	0.85198	0.51146	0.50000
H3	0.51136	0.65893	0.50000	H3	0.51146	0.65948	0.50000
H4	0.48864	0.34107	0.50000	H4	0.48854	0.34052	0.50000
H5	0.34107	0.85243	0.50000	H5	0.34052	0.85198	0.50000
H6	0.65893	0.14757	0.50000	H6	0.65948	0.14802	0.50000
H7	0.48864	0.14757	0.50000	H7	0.48854	0.14802	0.50000
H8	0.51136	0.85243	0.50000	H8	0.51146	0.85198	0.50000

H9	0.65893	0.51136	0.50000	H9	0.65948	0.51146	0.50000
H10	0.34107	0.48864	0.50000	H10	0.34052	0.48854	0.50000
H11	0.85243	0.34107	0.50000	H11	0.85198	0.34052	0.50000
H12	0.14757	0.65893	0.50000	H12	0.14802	0.65948	0.50000
N1	0.24011	0.57236	0.50000	N1	0.24017	0.57210	0.50000
N2	0.75989	0.42763	0.50000	N2	0.75983	0.42790	0.50000
N3	0.42763	0.66775	0.50000	N3	0.42790	0.66807	0.50000
N4	0.57236	0.33225	0.50000	N4	0.57210	0.33193	0.50000
N5	0.33225	0.75989	0.50000	N5	0.33193	0.75983	0.50000
N6	0.66775	0.24011	0.50000	N6	0.66807	0.24017	0.50000
N7	0.57236	0.24011	0.50000	N7	0.57210	0.24017	0.50000
N8	0.42763	0.75989	0.50000	N8	0.42790	0.75983	0.50000
N9	0.66775	0.42763	0.50000	N9	0.66807	0.42790	0.50000
N10	0.33225	0.57236	0.50000	N10	0.33193	0.57210	0.50000
N11	0.75989	0.33225	0.50000	N11	0.75983	0.33193	0.50000
N12	0.24011	0.66775	0.50000	N12	0.24017	0.66807	0.50000
Cr1	0.50000	0.50000	0.50000	Cu1	0.50000	0.50000	0.50000
Cr2	0.50000	0.00000	0.50000	Cu2	0.50000	0.00000	0.50000
Cr3	0.00000	0.50000	0.50000	Cu3	0.00000	0.50000	0.50000

Fe₃(HATNA)₂

coordinates

Mn₃(HATNA)

coordinates

x

y

z

²

x

y

z

O1

0.05263

0.56853

0.50000

O1

0.05362

0.56950

0.50000

O2	0.94737	0.43147	0.50000	O2	0.94638	0.43050	0.50000
O3	0.43147	0.48411	0.50000	O3	0.43050	0.48411	0.50000
O4	0.56853	0.51589	0.50000	O4	0.56950	0.51589	0.50000
O5	0.51589	0.94737	0.50000	O5	0.51589	0.94638	0.50000
O6	0.48411	0.05263	0.50000	O6	0.48411	0.05362	0.50000
O7	0.56853	0.05263	0.50000	O7	0.56950	0.05362	0.50000
O8	0.43147	0.94737	0.50000	O8	0.43050	0.94638	0.50000
O9	0.48411	0.43147	0.50000	O9	0.48411	0.43050	0.50000
O10	0.51589	0.56853	0.50000	O10	0.51589	0.56950	0.50000
O11	0.94737	0.51589	0.50000	O11	0.94638	0.51589	0.50000
O12	0.05263	0.48411	0.50000	O12	0.05362	0.48411	0.50000
C1	0.38253	0.71612	0.50000	C1	0.38239	0.71595	0.50000
C2	0.61747	0.28388	0.50000	C2	0.61761	0.28405	0.50000
C3	0.28388	0.66641	0.50000	C3	0.28405	0.66644	0.50000
C4	0.71612	0.33359	0.50000	C4	0.71595	0.33356	0.50000
C5	0.33359	0.61747	0.50000	C5	0.33356	0.61761	0.50000
C6	0.66641	0.38253	0.50000	C6	0.66644	0.38239	0.50000
C7	0.71612	0.38253	0.50000	C7	0.71595	0.38239	0.50000
C8	0.28388	0.61747	0.50000	C8	0.28405	0.61761	0.50000
C9	0.66641	0.28388	0.50000	C9	0.66644	0.28405	0.50000
C10	0.33359	0.71612	0.50000	C10	0.33356	0.71595	0.50000
C11	0.61747	0.33359	0.50000	C11	0.61761	0.33356	0.50000
C12	0.38253	0.66641	0.50000	C12	0.38239	0.66644	0.50000

C13	0.19410	0.57233	0.50000	C13	0.19459	0.57263	0.50000
C14	0.80590	0.42767	0.50000	C14	0.80541	0.42737	0.50000
C15	0.42767	0.62177	0.50000	C15	0.42737	0.62195	0.50000
C16	0.57233	0.37823	0.50000	C16	0.57263	0.37805	0.50000
C17	0.37823	0.80590	0.50000	C17	0.37805	0.80541	0.50000
C18	0.62177	0.19410	0.50000	C18	0.62195	0.19459	0.50000
C19	0.57233	0.19410	0.50000	C19	0.57263	0.19459	0.50000
C20	0.42767	0.80590	0.50000	C20	0.42737	0.80541	0.50000
C21	0.62177	0.42767	0.50000	C21	0.62195	0.42737	0.50000
C22	0.37823	0.57233	0.50000	C22	0.37805	0.57263	0.50000
C23	0.80590	0.37823	0.50000	C23	0.80541	0.37805	0.50000
C24	0.19410	0.62177	0.50000	C24	0.19459	0.62195	0.50000
C25	0.14659	0.52418	0.50000	C25	0.14714	0.52474	0.50000
C26	0.85341	0.47582	0.50000	C26	0.85286	0.47526	0.50000
C27	0.47582	0.62241	0.50000	C27	0.47526	0.62241	0.50000
C28	0.52418	0.37759	0.50000	C28	0.52474	0.37759	0.50000
C29	0.37759	0.85341	0.50000	C29	0.37759	0.85286	0.50000
C30	0.62241	0.14659	0.50000	C30	0.62241	0.14714	0.50000
C31	0.52418	0.14659	0.50000	C31	0.52474	0.14714	0.50000
C32	0.47582	0.85341	0.50000	C32	0.47526	0.85286	0.50000
C33	0.62241	0.47582	0.50000	C33	0.62241	0.47526	0.50000
C34	0.37759	0.52418	0.50000	C34	0.37759	0.52474	0.50000
C35	0.85341	0.37759	0.50000	C35	0.85286	0.37759	0.50000

C36	0.14659	0.62241	0.50000	C36	0.14714	0.62241	0.50000
C37	0.10047	0.52564	0.50000	C37	0.10105	0.52598	0.50000
C38	0.89953	0.47436	0.50000	C38	0.89895	0.47402	0.50000
C39	0.47436	0.57483	0.50000	C39	0.47402	0.57507	0.50000
C40	0.52564	0.42517	0.50000	C40	0.52598	0.42493	0.50000
C41	0.42517	0.89953	0.50000	C41	0.42493	0.89895	0.50000
C42	0.57483	0.10047	0.50000	C42	0.57507	0.10105	0.50000
C43	0.52564	0.10047	0.50000	C43	0.52598	0.10105	0.50000
C44	0.47436	0.89953	0.50000	C44	0.47402	0.89895	0.50000
C45	0.57483	0.47436	0.50000	C45	0.57507	0.47402	0.50000
C46	0.42517	0.52564	0.50000	C46	0.42493	0.52598	0.50000
C47	0.89953	0.42517	0.50000	C47	0.89895	0.42493	0.50000
C48	0.10047	0.57483	0.50000	C48	0.10105	0.57507	0.50000
H1	0.14701	0.48751	0.50000	H1	0.14736	0.48811	0.50000
H2	0.85299	0.51249	0.50000	H2	0.85264	0.51189	0.50000
H3	0.51249	0.65949	0.50000	H3	0.51189	0.65925	0.50000
H4	0.48751	0.34051	0.50000	H4	0.48811	0.34075	0.50000
H5	0.34051	0.85299	0.50000	H5	0.34075	0.85264	0.50000
H6	0.65949	0.14701	0.50000	H6	0.65925	0.14736	0.50000
H7	0.48751	0.14701	0.50000	H7	0.48811	0.14736	0.50000
H8	0.51249	0.85299	0.50000	H8	0.51189	0.85264	0.50000
H9	0.65949	0.51249	0.50000	H9	0.65925	0.51189	0.50000
H10	0.34051	0.48751	0.50000	H10	0.34075	0.48811	0.50000

H11	0.85299	0.34051	0.50000	H11	0.85264	0.34075	0.50000
H12	0.14701	0.65949	0.50000	H12	0.14736	0.65925	0.50000
N1	0.23958	0.57182	0.50000	N1	0.23987	0.57203	0.50000
N2	0.76042	0.42818	0.50000	N2	0.76013	0.42797	0.50000
N3	0.42818	0.66776	0.50000	N3	0.42797	0.66784	0.50000
N4	0.57182	0.33224	0.50000	N4	0.57203	0.33216	0.50000
N5	0.33224	0.76042	0.50000	N5	0.33216	0.76013	0.50000
N6	0.66776	0.23958	0.50000	N6	0.66784	0.23987	0.50000
N7	0.57182	0.23958	0.50000	N7	0.57203	0.23987	0.50000
N8	0.42818	0.76042	0.50000	N8	0.42797	0.76013	0.50000
N9	0.66776	0.42818	0.50000	N9	0.66784	0.42797	0.50000
N10	0.33224	0.57182	0.50000	N10	0.33216	0.57203	0.50000
N11	0.76042	0.33224	0.50000	N11	0.76013	0.33216	0.50000
N12	0.23958	0.66776	0.50000	N12	0.23987	0.66784	0.50000
Fe1	0.50000	0.50000	0.50000	Mn1	0.50000	0.50000	0.50000
Fe2	0.50000	0.00000	0.50000	Mn2	0.50000	0.00000	0.50000
Fe3	0.00000	0.50000	0.50000	Mn3	0.00000	0.50000	0.50000
Ni ₃ (HATNA) ₂	coordinates			Pd ₃ (HATNA) ₂	coordinates		
	x	y	z		x	y	z
O1	0.05181	0.56896	0.50000	O1	0.05741	0.57273	0.50000
O2	0.94819	0.43104	0.50000	O2	0.94259	0.42727	0.50000
O3	0.43104	0.48285	0.50000	O3	0.42727	0.48468	0.50000

O4	0.56896	0.51715	0.50000	O4	0.57273	0.51532	0.50000
O5	0.51715	0.94819	0.50000	O5	0.51532	0.94259	0.50000
O6	0.48285	0.05181	0.50000	O6	0.48468	0.05741	0.50000
O7	0.56896	0.05181	0.50000	O7	0.57273	0.05741	0.50000
O8	0.43104	0.94819	0.50000	O8	0.42727	0.94259	0.50000
O9	0.48285	0.43104	0.50000	O9	0.48468	0.42727	0.50000
O10	0.51715	0.56896	0.50000	O10	0.51532	0.57273	0.50000
O11	0.94819	0.51715	0.50000	O11	0.94259	0.51532	0.50000
O12	0.05181	0.48285	0.50000	O12	0.05741	0.48468	0.50000
C1	0.38289	0.71637	0.50000	C1	0.38211	0.71555	0.50000
C2	0.61711	0.28363	0.50000	C2	0.61789	0.28445	0.50000
C3	0.28363	0.66652	0.50000	C3	0.28445	0.66656	0.50000
C4	0.71637	0.33348	0.50000	C4	0.71555	0.33344	0.50000
C5	0.33348	0.61711	0.50000	C5	0.33344	0.61789	0.50000
C6	0.66652	0.38289	0.50000	C6	0.66656	0.38211	0.50000
C7	0.71637	0.38289	0.50000	C7	0.71555	0.38211	0.50000
C8	0.28363	0.61711	0.50000	C8	0.28445	0.61789	0.50000
C9	0.66652	0.28363	0.50000	C9	0.66656	0.28445	0.50000
C10	0.33348	0.71637	0.50000	C10	0.33344	0.71555	0.50000
C11	0.61711	0.33348	0.50000	C11	0.61789	0.33344	0.50000
C12	0.38289	0.66652	0.50000	C12	0.38211	0.66656	0.50000
C13	0.19332	0.57166	0.50000	C13	0.19577	0.57335	0.50000
C14	0.80668	0.42834	0.50000	C14	0.80423	0.42666	0.50000

C15	0.42834	0.62166	0.50000	C15	0.42666	0.62243	0.50000
C16	0.57166	0.37834	0.50000	C16	0.57335	0.37757	0.50000
C17	0.37834	0.80668	0.50000	C17	0.37757	0.80423	0.50000
C18	0.62166	0.19332	0.50000	C18	0.62243	0.19577	0.50000
C19	0.57166	0.19332	0.50000	C19	0.57335	0.19577	0.50000
C20	0.42834	0.80668	0.50000	C20	0.42666	0.80423	0.50000
C21	0.62166	0.42834	0.50000	C21	0.62243	0.42666	0.50000
C22	0.37834	0.57166	0.50000	C22	0.37757	0.57335	0.50000
C23	0.80668	0.37834	0.50000	C23	0.80423	0.37757	0.50000
C24	0.19332	0.62166	0.50000	C24	0.19577	0.62243	0.50000
C25	0.14582	0.52349	0.50000	C25	0.14910	0.52630	0.50000
C26	0.85418	0.47651	0.50000	C26	0.85090	0.47370	0.50000
C27	0.47651	0.62233	0.50000	C27	0.47370	0.62280	0.50000
C28	0.52349	0.37767	0.50000	C28	0.52630	0.37720	0.50000
C29	0.37767	0.85418	0.50000	C29	0.37720	0.85090	0.50000
C30	0.62233	0.14582	0.50000	C30	0.62280	0.14910	0.50000
C31	0.52349	0.14582	0.50000	C31	0.52630	0.14910	0.50000
C32	0.47651	0.85418	0.50000	C32	0.47370	0.85090	0.50000
C33	0.62233	0.47651	0.50000	C33	0.62280	0.47370	0.50000
C34	0.37767	0.52349	0.50000	C34	0.37720	0.52630	0.50000
C35	0.85418	0.37767	0.50000	C35	0.85090	0.37720	0.50000
C36	0.14582	0.62233	0.50000	C36	0.14910	0.62280	0.50000
C37	0.09901	0.52470	0.50000	C37	0.10271	0.52688	0.50000

C38	0.90099	0.47530	0.50000	C38	0.89729	0.47312	0.50000
C39	0.47530	0.57431	0.50000	C39	0.47312	0.57583	0.50000
C40	0.52470	0.42569	0.50000	C40	0.52688	0.42417	0.50000
C41	0.42569	0.90099	0.50000	C41	0.42417	0.89729	0.50000
C42	0.57431	0.09901	0.50000	C42	0.57583	0.10271	0.50000
C43	0.52470	0.09901	0.50000	C43	0.52688	0.10271	0.50000
C44	0.47530	0.90099	0.50000	C44	0.47312	0.89729	0.50000
C45	0.57431	0.47530	0.50000	C45	0.57583	0.47312	0.50000
C46	0.42569	0.52470	0.50000	C46	0.42417	0.52688	0.50000
C47	0.90099	0.42569	0.50000	C47	0.89729	0.42417	0.50000
C48	0.09901	0.57431	0.50000	C48	0.10271	0.57583	0.50000
H1	0.14610	0.48655	0.50000	H1	0.14910	0.48991	0.50000
H2	0.85390	0.51345	0.50000	H2	0.85090	0.51009	0.50000
H3	0.51345	0.65955	0.50000	H3	0.51009	0.65920	0.50000
H4	0.48655	0.34045	0.50000	H4	0.48991	0.34080	0.50000
H5	0.34045	0.85390	0.50000	H5	0.34080	0.85090	0.50000
H6	0.65955	0.14610	0.50000	H6	0.65920	0.14910	0.50000
H7	0.48655	0.14610	0.50000	H7	0.48991	0.14910	0.50000
H8	0.51345	0.85390	0.50000	H8	0.51009	0.85090	0.50000
H9	0.65955	0.51345	0.50000	H9	0.65920	0.51009	0.50000
H10	0.34045	0.48655	0.50000	H10	0.34080	0.48991	0.50000
H11	0.85390	0.34045	0.50000	H11	0.85090	0.34080	0.50000
H12	0.14610	0.65955	0.50000	H12	0.14910	0.65920	0.50000

N1	0.23917	0.57124	0.50000	N1	0.24079	0.57285	0.50000
N2	0.76083	0.42876	0.50000	N2	0.75921	0.42715	0.50000
N3	0.42876	0.66793	0.50000	N3	0.42715	0.66793	0.50000
N4	0.57124	0.33207	0.50000	N4	0.57285	0.33207	0.50000
N5	0.33207	0.76083	0.50000	N5	0.33207	0.75921	0.50000
N6	0.66793	0.23917	0.50000	N6	0.66793	0.24079	0.50000
N7	0.57124	0.23917	0.50000	N7	0.57285	0.24079	0.50000
N8	0.42876	0.76083	0.50000	N8	0.42715	0.75921	0.50000
N9	0.66793	0.42876	0.50000	N9	0.66793	0.42715	0.50000
N10	0.33207	0.57124	0.50000	N10	0.33207	0.57285	0.50000
N11	0.76083	0.33207	0.50000	N11	0.75921	0.33207	0.50000
N12	0.23917	0.66793	0.50000	N12	0.24079	0.66793	0.50000
Ni1	0.50000	0.50000	0.50000	Pd1	0.50000	0.50000	0.50000
Ni2	0.50000	0.00000	0.50000	Pd2	0.50000	0.00000	0.50000
Ni3	0.00000	0.50000	0.50000	Pd3	0.00000	0.50000	0.50000

Rh ₃ (HATNA) ₂	coordinates			Ru ₃ (HATNA) ₂	coordinates		
	x	y	z		x	y	z
O1	0.05683	0.57191	0.50000	O1	0.0575	0.57056	0.50000
O2	0.94317	0.42809	0.50000	O2	0.9425	0.42944	0.50000
O3	0.42809	0.48492	0.50000	O3	0.42944	0.48694	0.50000
O4	0.57191	0.51508	0.50000	O4	0.57056	0.51306	0.50000
O5	0.51508	0.94317	0.50000	O5	0.51306	0.94250	0.50000

O6	0.48492	0.05683	0.50000	O6	0.48694	0.05750	0.50000
O7	0.57191	0.05683	0.50000	O7	0.57056	0.05750	0.50000
O8	0.42809	0.94317	0.50000	O8	0.42944	0.94250	0.50000
O9	0.48492	0.42809	0.50000	O9	0.48694	0.42944	0.50000
O10	0.51508	0.57191	0.50000	O10	0.51306	0.57056	0.50000
O11	0.94317	0.51508	0.50000	O11	0.94250	0.51306	0.50000
O12	0.05683	0.48492	0.50000	O12	0.05750	0.48694	0.50000
C1	0.38193	0.7155	0.50000	C1	0.38173	0.71535	0.50000
C2	0.61807	0.2845	0.50000	C2	0.61827	0.28465	0.50000
C3	0.28450	0.66643	0.50000	C3	0.28465	0.66638	0.50000
C4	0.71550	0.33357	0.50000	C4	0.71535	0.33362	0.50000
C5	0.33357	0.61807	0.50000	C5	0.33362	0.61827	0.50000
C6	0.66643	0.38193	0.50000	C6	0.66638	0.38173	0.50000
C7	0.71550	0.38193	0.50000	C7	0.71535	0.38173	0.50000
C8	0.28450	0.61807	0.50000	C8	0.28465	0.61827	0.50000
C9	0.66643	0.28450	0.50000	C9	0.66638	0.28465	0.50000
C10	0.33357	0.71550	0.50000	C10	0.33362	0.71535	0.50000
C11	0.61807	0.33357	0.50000	C11	0.61827	0.33362	0.50000
C12	0.38193	0.66643	0.50000	C12	0.38173	0.66638	0.50000
C13	0.19591	0.57357	0.50000	C13	0.19646	0.57398	0.50000
C14	0.80409	0.42643	0.50000	C14	0.80354	0.42602	0.50000
C15	0.42643	0.62234	0.50000	C15	0.42602	0.62248	0.50000
C16	0.57357	0.37766	0.50000	C16	0.57398	0.37752	0.50000

C17	0.37766	0.80409	0.50000	C17	0.37752	0.80354	0.50000
C18	0.62234	0.19591	0.50000	C18	0.62248	0.19646	0.50000
C19	0.57357	0.19591	0.50000	C19	0.57398	0.19646	0.50000
C20	0.42643	0.80409	0.50000	C20	0.42602	0.80354	0.50000
C21	0.62234	0.42643	0.50000	C21	0.62248	0.42602	0.50000
C22	0.37766	0.57357	0.50000	C22	0.37752	0.57398	0.50000
C23	0.80409	0.37766	0.50000	C23	0.80354	0.37752	0.50000
C24	0.19591	0.62234	0.50000	C24	0.19646	0.62248	0.50000
C25	0.14885	0.52625	0.50000	C25	0.14969	0.52676	0.50000
C26	0.85115	0.47375	0.50000	C26	0.85031	0.47324	0.50000
C27	0.47375	0.62260	0.50000	C27	0.47324	0.62293	0.50000
C28	0.52625	0.37740	0.50000	C28	0.52676	0.37707	0.50000
C29	0.37740	0.85115	0.50000	C29	0.37707	0.85031	0.50000
C30	0.62260	0.14885	0.50000	C30	0.62293	0.14969	0.50000
C31	0.52625	0.14885	0.50000	C31	0.52676	0.14969	0.50000
C32	0.47375	0.85115	0.50000	C32	0.47324	0.85031	0.50000
C33	0.62260	0.47375	0.50000	C33	0.62293	0.47324	0.50000
C34	0.37740	0.52625	0.50000	C34	0.37707	0.52676	0.50000
C35	0.85115	0.37740	0.50000	C35	0.85031	0.37707	0.50000
C36	0.14885	0.62260	0.50000	C36	0.14969	0.62293	0.50000
C37	0.10283	0.52710	0.50000	C37	0.10429	0.52800	0.50000
C38	0.89717	0.47290	0.50000	C38	0.89571	0.47200	0.50000
C39	0.47290	0.57573	0.50000	C39	0.47200	0.57629	0.50000

C40	0.52710	0.42427	0.50000	C40	0.52800	0.42371	0.50000
C41	0.42427	0.89717	0.50000	C41	0.42371	0.89571	0.50000
C42	0.57573	0.10283	0.50000	C42	0.57629	0.10429	0.50000
C43	0.52710	0.10283	0.50000	C43	0.52800	0.10429	0.50000
C44	0.47290	0.89717	0.50000	C44	0.47200	0.89571	0.50000
C45	0.57573	0.4729	0.50000	C45	0.57629	0.47200	0.50000
C46	0.42427	0.5271	0.50000	C46	0.42371	0.52800	0.50000
C47	0.89717	0.42427	0.50000	C47	0.89571	0.42371	0.50000
C48	0.10283	0.57573	0.50000	C48	0.10429	0.57629	0.50000
H1	0.14889	0.48986	0.50000	H1	0.14987	0.49061	0.50000
H2	0.85111	0.51014	0.50000	H2	0.85013	0.50939	0.50000
H3	0.51014	0.65903	0.50000	H3	0.50939	0.65926	0.50000
H4	0.48986	0.34097	0.50000	H4	0.49061	0.34074	0.50000
H5	0.34097	0.85111	0.50000	H5	0.34074	0.85013	0.50000
H6	0.65903	0.14889	0.50000	H6	0.65926	0.14987	0.50000
H7	0.48986	0.14889	0.50000	H7	0.49061	0.14987	0.50000
H8	0.51014	0.85111	0.50000	H8	0.50939	0.85013	0.50000
H9	0.65903	0.51014	0.50000	H9	0.65926	0.50939	0.50000
H10	0.34097	0.48986	0.50000	H10	0.34074	0.49061	0.50000
H11	0.85111	0.34097	0.50000	H11	0.85013	0.34074	0.50000
H12	0.14889	0.65903	0.50000	H12	0.14987	0.65926	0.50000
N1	0.24075	0.57291	0.50000	N1	0.24116	0.57339	0.50000
N2	0.75925	0.42709	0.50000	N2	0.75884	0.42661	0.50000

N3	0.42709	0.66784	0.50000	N3	0.42661	0.66777	0.50000
N4	0.57291	0.33216	0.50000	N4	0.57339	0.33223	0.50000
N5	0.33216	0.75925	0.50000	N5	0.33223	0.75884	0.50000
N6	0.66784	0.24075	0.50000	N6	0.66777	0.24116	0.50000
N7	0.57291	0.24075	0.50000	N7	0.57339	0.24116	0.50000
N8	0.42709	0.75925	0.50000	N8	0.42661	0.75884	0.50000
N9	0.66784	0.42709	0.50000	N9	0.66777	0.42661	0.50000
N10	0.33216	0.57291	0.50000	N10	0.33223	0.57339	0.50000
N11	0.75925	0.33216	0.50000	N11	0.75884	0.33223	0.50000
N12	0.24075	0.66784	0.50000	N12	0.24116	0.66777	0.50000
Rh1	0.50000	0.50000	0.50000	Ru1	0.50000	0.50000	0.50000
Rh2	0.50000	0.00000	0.50000	Ru2	0.50000	0.00000	0.50000
Rh3	0.00000	0.50000	0.50000	Ru3	0.00000	0.50000	0.50000

Ag ₃ (HATNA) ₂				Ag ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z
O1	0.05824	0.57504	0.50006	O1	0.06131	0.57653	0.49947
O2	0.94185	0.42501	0.50011	O2	0.93866	0.42301	0.49958
O3	0.42244	0.4839	0.48083	O3	0.42180	0.49020	0.49030
O4	0.57727	0.51518	0.47296	O4	0.58029	0.51134	0.48720
O5	0.51735	0.94245	0.49996	O5	0.51191	0.93734	0.49875
O6	0.48263	0.05752	0.49991	O6	0.48762	0.06277	0.49896
O7	0.57483	0.05787	0.50008	O7	0.57649	0.06129	0.49947
O8	0.42518	0.94223	0.50004	O8	0.42296	0.93867	0.49953

O9	0.48394	0.42236	0.48085	O9	0.49006	0.42145	0.48473
O10	0.51515	0.57726	0.47309	O10	0.51135	0.58055	0.48045
O11	0.9422	0.51727	0.49989	O11	0.93734	0.51200	0.49882
O12	0.05789	0.48281	0.49996	O12	0.06276	0.48767	0.49902
O13	0.52574	0.53618	0.77512	O13	0.52785	0.53129	0.68998
O14	0.50758	0.50534	0.63941	O14	0.45697	0.45362	0.66710
C1	0.38186	0.71598	0.49955	C1	0.37865	0.71641	0.50320
C2	0.61818	0.28410	0.49959	C2	0.62121	0.28367	0.50280
C3	0.28443	0.66689	0.49958	C3	0.28334	0.66877	0.50238
C4	0.71562	0.33317	0.49953	C4	0.71665	0.33105	0.50255
C5	0.33285	0.61841	0.50077	C5	0.33141	0.62095	0.50171
C6	0.66722	0.38168	0.50078	C6	0.66887	0.37909	0.50201
C7	0.71572	0.38161	0.49954	C7	0.71640	0.37867	0.50304
C8	0.28432	0.61844	0.49959	C8	0.28372	0.62115	0.50261
C9	0.66667	0.28420	0.49954	C9	0.66881	0.28332	0.50249
C10	0.33335	0.71584	0.49958	C10	0.33104	0.71662	0.50257
C11	0.61818	0.33261	0.50086	C11	0.62098	0.33137	0.50162
C12	0.38189	0.66739	0.50070	C12	0.37908	0.66887	0.50208
C13	0.19600	0.57348	0.49997	C13	0.19699	0.57704	0.50121
C14	0.80406	0.42655	0.49994	C14	0.80310	0.42270	0.50143
C15	0.42627	0.62345	0.50348	C15	0.42313	0.62620	0.49583
C16	0.57381	0.37650	0.50282	C16	0.57757	0.37468	0.49539
C17	0.37741	0.80423	0.50008	C17	0.37452	0.80350	0.50078
C18	0.62250	0.19578	0.50016	C18	0.62513	0.19646	0.50069
C19	0.57322	0.19573	0.49997	C19	0.57708	0.19698	0.50134
C20	0.42670	0.80430	0.49991	C20	0.42266	0.80310	0.50152

C21	0.62342	0.42622	0.50326	C21	0.62607	0.42302	0.49628
C22	0.37661	0.57382	0.50307	C22	0.37482	0.57760	0.49609
C23	0.80398	0.37736	0.50011	C23	0.80352	0.37456	0.50077
C24	0.19610	0.62270	0.50013	C24	0.19648	0.62510	0.50066
C25	0.14928	0.52591	0.50001	C25	0.15186	0.53069	0.50057
C26	0.85080	0.47411	0.50005	C26	0.84826	0.46905	0.50058
C27	0.47342	0.62456	0.50169	C27	0.46915	0.62724	0.49184
C28	0.52660	0.37530	0.50080	C28	0.53179	0.37412	0.49178
C29	0.37688	0.85095	0.50001	C29	0.37467	0.84940	0.49966
C30	0.62308	0.14910	0.49999	C30	0.62490	0.15054	0.49954
C31	0.52571	0.14889	0.50003	C31	0.53073	0.15188	0.50065
C32	0.47423	0.85108	0.50002	C32	0.46898	0.84824	0.50065
C33	0.62456	0.47345	0.50207	C33	0.62699	0.46905	0.49403
C34	0.37531	0.52653	0.50039	C34	0.37439	0.53183	0.49406
C35	0.85057	0.37673	0.49998	C35	0.84940	0.37474	0.49962
C36	0.14950	0.62332	0.50000	C36	0.15058	0.62491	0.49954
C37	0.10308	0.52664	0.50000	C37	0.10542	0.52985	0.49967
C38	0.89700	0.47336	0.50000	C38	0.89466	0.46985	0.49964
C39	0.47302	0.57748	0.49044	C39	0.47046	0.58148	0.48699
C40	0.52671	0.42229	0.49228	C40	0.53082	0.42013	0.48826
C41	0.42410	0.89722	0.49997	C41	0.42101	0.89529	0.49961
C42	0.57587	0.10280	0.49994	C42	0.57853	0.10471	0.49954
C43	0.52651	0.10274	0.50000	C43	0.52983	0.10542	0.49969
C44	0.47346	0.89727	0.50001	C44	0.46976	0.89464	0.49964
C45	0.57751	0.47316	0.49109	C45	0.58126	0.47029	0.48975
C46	0.42224	0.52669	0.49154	C46	0.42042	0.53105	0.49048

C47	0.89691	0.42398	0.49994	C47	0.8953	0.42109	0.49959
C48	0.10316	0.57608	0.49997	C48	0.10473	0.57857	0.4995
C49	0.49564	0.50164	0.72187	C49	0.49736	0.49762	0.64374
H1	0.14956	0.48935	0.50003	H1	0.15278	0.49539	0.50074
H2	0.85049	0.51066	0.50005	H2	0.84731	0.50433	0.50070
H3	0.50998	0.66158	0.50183	H3	0.50447	0.66344	0.49111
H4	0.49009	0.33825	0.50098	H4	0.49623	0.33814	0.49121
H5	0.34012	0.85085	0.50002	H5	0.33901	0.84963	0.49901
H6	0.65985	0.14919	0.49997	H6	0.66052	0.15025	0.49894
H7	0.48916	0.14913	0.50004	H7	0.49544	0.15284	0.50084
H8	0.51080	0.85084	0.50004	H8	0.50426	0.84730	0.50078
H9	0.66160	0.50997	0.50169	H9	0.66316	0.50440	0.49466
H10	0.33825	0.49001	0.50094	H10	0.33848	0.49623	0.49487
H11	0.85044	0.33992	0.50000	H11	0.84963	0.33910	0.49902
H12	0.14966	0.66012	0.49998	H12	0.15030	0.66055	0.49903
H13	0.45899	0.46758	0.74694	H13	0.45485	0.45213	0.73277
N1	0.24066	0.57257	0.49966	N1	0.24117	0.57675	0.50212
N2	0.75937	0.42740	0.49963	N2	0.75896	0.42304	0.50264
N3	0.42732	0.66941	0.50326	N3	0.42340	0.67084	0.49925
N4	0.57270	0.33053	0.50303	N4	0.57683	0.32977	0.49834
N5	0.33141	0.75944	0.50002	N5	0.32968	0.75950	0.50132
N6	0.66854	0.24057	0.50009	N6	0.67002	0.24039	0.50127
N7	0.57230	0.24042	0.49965	N7	0.57680	0.24118	0.50238
N8	0.42774	0.75962	0.49961	N8	0.42301	0.75896	0.50282
N9	0.66934	0.42718	0.50302	N9	0.67073	0.42339	0.49952
N10	0.33077	0.57291	0.50326	N10	0.32989	0.57679	0.49895

N11	0.75924	0.33137	0.50004	N11	0.75953	0.32971	0.50139
N12	0.24080	0.66868	0.50007	N12	0.24040	0.67000	0.50131
Ag1	0.50010	0.50010	0.48643	Ag1	0.50247	0.50253	0.50528
Ag2	0.50000	0.00000	0.50001	Ag2	0.49974	0.00002	0.49900
Ag3	0.00002	0.50002	0.50001	Ag3	0.00002	0.49981	0.49901

Co ₃ (HATNA) ₂				Co ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z
O1	0.05181	0.56878	0.49926	O1	0.05110	0.56914	0.50023
O2	0.94829	0.43107	0.49922	O2	0.94896	0.43078	0.50024
O3	0.43453	0.48637	0.51371	O3	0.43112	0.48287	0.49160
O4	0.57191	0.51908	0.48650	O4	0.57020	0.51820	0.49020
O5	0.51702	0.94841	0.50005	O5	0.51796	0.94896	0.49988
O6	0.48269	0.05179	0.49923	O6	0.48197	0.05115	0.49989
O7	0.56869	0.05181	0.49927	O7	0.56915	0.05112	0.50022
O8	0.43102	0.94831	0.49910	O8	0.43078	0.94899	0.50023
O9	0.48638	0.43465	0.51440	O9	0.48293	0.43115	0.49020
O10	0.51902	0.57189	0.48576	O10	0.51819	0.57014	0.49051
O11	0.94831	0.51694	0.50006	O11	0.94892	0.51794	0.49989
O12	0.05182	0.48289	0.49962	O12	0.05116	0.48198	0.49990
O13	0.49995	0.49924	0.77469	O13	0.53470	0.53614	0.67236
O14	0.51900	0.51994	0.63318	O14	0.45894	0.45639	0.66089
C1	0.38274	0.71660	0.49844	C1	0.38280	0.71663	0.50199
C2	0.61713	0.28390	0.50016	C2	0.61722	0.28356	0.50198
C3	0.28381	0.66642	0.50024	C3	0.28352	0.66657	0.50118

C4	0.71632	0.33347	0.49995	C4	0.71656	0.33343	0.50119
C5	0.33390	0.61742	0.50019	C5	0.33347	0.61724	0.50153
C6	0.66691	0.38301	0.49638	C6	0.66683	0.38294	0.50166
C7	0.71652	0.38268	0.49838	C7	0.71663	0.38279	0.50203
C8	0.28392	0.61726	0.50015	C8	0.28355	0.61723	0.50195
C9	0.66628	0.28378	0.50013	C9	0.66659	0.28354	0.50120
C10	0.33354	0.71641	0.50009	C10	0.33340	0.71655	0.50120
C11	0.61732	0.33389	0.50033	C11	0.61725	0.33349	0.50157
C12	0.38306	0.66699	0.49616	C12	0.38295	0.66681	0.50154
C13	0.19373	0.57184	0.50018	C13	0.19321	0.57161	0.50037
C14	0.80654	0.42791	0.50051	C14	0.80692	0.42831	0.50037
C15	0.42905	0.6229	0.49235	C15	0.42871	0.62225	0.49630
C16	0.57301	0.37976	0.50261	C16	0.57197	0.37851	0.49623
C17	0.37819	0.80653	0.50097	C17	0.37818	0.80691	0.49987
C18	0.62137	0.19362	0.50035	C18	0.62167	0.19318	0.49988
C19	0.57166	0.19368	0.50015	C19	0.57161	0.19320	0.50039
C20	0.42799	0.80665	0.50067	C20	0.42829	0.80695	0.50039
C21	0.62293	0.42910	0.49309	C21	0.62228	0.42871	0.49635
C22	0.37968	0.57302	0.50214	C22	0.37850	0.57194	0.49642
C23	0.80645	0.37812	0.50082	C23	0.80688	0.37817	0.49985
C24	0.19366	0.62154	0.50050	C24	0.19319	0.62171	0.49987
C25	0.14595	0.5236	0.50003	C25	0.14543	0.52299	0.49985
C26	0.85421	0.47621	0.50096	C26	0.85467	0.47693	0.49983
C27	0.47736	0.62425	0.48587	C27	0.47725	0.62334	0.49318
C28	0.52558	0.38011	0.51043	C28	0.52356	0.37764	0.49304
C29	0.37766	0.85425	0.50074	C29	0.37740	0.85470	0.49957

C30	0.62197	0.14592	0.50026	C30	0.62249	0.14541	0.49958
C31	0.52339	0.14588	0.49995	C31	0.52299	0.14543	0.49987
C32	0.47630	0.85434	0.50110	C32	0.47692	0.85468	0.49985
C33	0.62427	0.47741	0.48689	C33	0.62341	0.47726	0.49320
C34	0.38004	0.52561	0.50999	C34	0.37762	0.52351	0.49368
C35	0.85418	0.37761	0.5007	C35	0.85468	0.37740	0.49956
C36	0.14596	0.62213	0.50044	C36	0.14538	0.62249	0.49957
C37	0.09940	0.52492	0.49986	C37	0.09883	0.52452	0.49969
C38	0.90074	0.47492	0.50046	C38	0.90126	0.47541	0.49967
C39	0.47728	0.57687	0.49234	C39	0.47594	0.57511	0.49180
C40	0.52748	0.42843	0.50740	C40	0.52512	0.42597	0.49137
C41	0.42554	0.90079	0.50009	C41	0.42561	0.9013	0.49976
C42	0.57416	0.09934	0.49974	C42	0.57430	0.09879	0.49976
C43	0.52473	0.09935	0.49966	C43	0.52451	0.09882	0.49970
C44	0.47501	0.90086	0.50052	C44	0.47542	0.90129	0.49968
C45	0.57687	0.47731	0.49310	C45	0.57519	0.47595	0.49138
C46	0.42835	0.52749	0.50676	C46	0.42594	0.52505	0.49226
C47	0.90072	0.42552	0.50010	C47	0.90129	0.42562	0.49975
C48	0.09937	0.5743	0.49982	C48	0.09878	0.57429	0.49976
C49	0.48870	0.48704	0.69644	C49	0.50098	0.50064	0.62851
H1	0.14625	0.48670	0.50001	H1	0.14577	0.48580	0.49989
H2	0.85371	0.51300	0.50112	H2	0.85417	0.51405	0.49986
H3	0.51365	0.66160	0.47796	H3	0.51443	0.66089	0.49340
H4	0.48866	0.34342	0.51891	H4	0.48638	0.34010	0.49335
H5	0.34046	0.85395	0.50081	H5	0.33989	0.85442	0.49985
H6	0.65923	0.14635	0.50047	H6	0.66002	0.14573	0.49983

H7	0.48648	0.14614	0.50002	H7	0.48580	0.14577	0.49990
H8	0.51311	0.85387	0.50121	H8	0.51402	0.85419	0.49987
H9	0.66161	0.51373	0.47918	H9	0.66094	0.51442	0.49376
H10	0.34339	0.4887	0.51869	H10	0.34009	0.48635	0.49399
H11	0.85391	0.34043	0.50080	H11	0.85438	0.33985	0.49986
H12	0.14637	0.65938	0.50074	H12	0.1457	0.66005	0.49985
H13	0.45440	0.44979	0.6736	H13	0.46135	0.45946	0.72634
N1	0.23943	0.57131	0.50002	N1	0.23898	0.5708	0.50152
N2	0.76099	0.42858	0.49929	N2	0.76120	0.42918	0.50157
N3	0.42895	0.6689	0.49085	N3	0.42933	0.66882	0.49956
N4	0.57188	0.33309	0.50446	N4	0.57101	0.33177	0.49958
N5	0.33198	0.76083	0.50120	N5	0.33157	0.76111	0.50013
N6	0.66760	0.23925	0.50039	N6	0.66832	0.23894	0.50013
N7	0.57116	0.2394	0.50007	N7	0.57081	0.23897	0.50154
N8	0.42864	0.76108	0.49940	N8	0.42917	0.76124	0.50157
N9	0.66892	0.42897	0.49144	N9	0.66884	0.42933	0.49982
N10	0.33303	0.57194	0.50423	N10	0.33176	0.57100	0.49963
N11	0.76073	0.33190	0.50103	N11	0.76109	0.33155	0.50011
N12	0.23931	0.66778	0.50061	N12	0.23894	0.66836	0.50013
Co1	0.50441	0.50449	0.51285	Co1	0.50067	0.50061	0.50012
Co2	0.49985	0.00008	0.49915	Co2	0.49997	0.00005	0.50031
Co3	0.00005	0.49992	0.49931	Co3	0.00004	0.49996	0.50033
Cu ₃ (HATNA) ₂				Cu ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z

O1	0.05558	0.57190	0.49967	O1	0.05527	0.57184	0.49995
O2	0.94454	0.42811	0.49996	O2	0.94452	0.42813	0.50025
O3	0.43023	0.48546	0.50807	O3	0.42804	0.48402	0.48555
O4	0.57337	0.51687	0.48178	O4	0.57190	0.51639	0.48562
O5	0.51636	0.94458	0.49911	O5	0.51633	0.94465	0.49964
O6	0.48360	0.05544	0.49924	O6	0.48371	0.05571	0.49940
O7	0.57186	0.05554	0.49986	O7	0.57188	0.05559	0.50024
O8	0.42811	0.94451	0.49989	O8	0.42815	0.94478	0.50000
O9	0.48560	0.43037	0.50854	O9	0.48366	0.42830	0.48764
O10	0.51651	0.57301	0.47802	O10	0.51609	0.57201	0.48721
O11	0.94459	0.51635	0.49919	O11	0.94442	0.51629	0.49945
O12	0.05546	0.48361	0.49929	O12	0.05549	0.48371	0.49937
O13	0.51087	0.51217	0.78479	O13	0.52133	0.48008	0.67927
O14	0.52273	0.52539	0.63991	O14	0.47571	0.52330	0.67035
C1	0.38244	0.71590	0.50022	C1	0.38231	0.71595	0.50149
C2	0.61747	0.28424	0.50028	C2	0.61754	0.28438	0.50132
C3	0.28425	0.66652	0.50101	C3	0.28411	0.66681	0.50140
C4	0.71584	0.33335	0.50102	C4	0.71572	0.33352	0.50118
C5	0.33346	0.61740	0.49964	C5	0.33333	0.61771	0.50055
C6	0.66682	0.38253	0.49780	C6	0.66654	0.38268	0.50139
C7	0.71593	0.38239	0.49995	C7	0.71576	0.38256	0.50152
C8	0.28426	0.61745	0.50041	C8	0.28413	0.61779	0.50159
C9	0.66654	0.28422	0.50092	C9	0.66657	0.28441	0.50114
C10	0.33340	0.71580	0.50112	C10	0.33328	0.71596	0.50138
C11	0.61745	0.33344	0.49941	C11	0.61746	0.33361	0.50108
C12	0.38257	0.66678	0.49812	C12	0.38238	0.66676	0.50052

C13	0.19484	0.57246	0.50077	C13	0.19472	0.57275	0.50066
C14	0.80527	0.42737	0.50127	C14	0.80516	0.42750	0.50039
C15	0.42776	0.62267	0.49304	C15	0.42723	0.62236	0.49501
C16	0.57289	0.3783	0.49812	C16	0.57257	0.37808	0.49821
C17	0.37772	0.80519	0.50120	C17	0.37768	0.80538	0.50026
C18	0.62214	0.19483	0.50096	C18	0.62225	0.19500	0.50012
C19	0.57245	0.19482	0.50081	C19	0.57256	0.19499	0.50041
C20	0.42742	0.80523	0.50130	C20	0.42734	0.80536	0.50063
C21	0.62277	0.42777	0.49323	C21	0.62214	0.42760	0.49863
C22	0.37826	0.5728	0.49798	C22	0.37766	0.57282	0.49497
C23	0.80523	0.37767	0.50126	C23	0.80512	0.3778	0.50007
C24	0.19487	0.62215	0.50095	C24	0.19469	0.62239	0.50025
C25	0.14793	0.52503	0.50064	C25	0.14792	0.52530	0.50028
C26	0.85210	0.47485	0.50131	C26	0.85200	0.47487	0.50006
C27	0.47522	0.62381	0.48832	C27	0.47469	0.62303	0.49331
C28	0.52576	0.37807	0.50289	C28	0.52510	0.37739	0.49700
C29	0.37715	0.85204	0.50068	C29	0.37714	0.85226	0.49973
C30	0.62277	0.14802	0.50054	C30	0.62284	0.14813	0.49974
C31	0.52502	0.14792	0.50071	C31	0.52518	0.14816	0.50009
C32	0.47488	0.85208	0.50129	C32	0.47478	0.85218	0.50028
C33	0.62397	0.47528	0.48917	C33	0.62279	0.47502	0.49744
C34	0.37796	0.52564	0.50257	C34	0.37699	0.52535	0.49290
C35	0.85207	0.37712	0.50078	C35	0.85198	0.37718	0.49974
C36	0.14807	0.62279	0.50049	C36	0.14778	0.62290	0.49971
C37	0.10081	0.52532	0.50002	C37	0.10073	0.52550	0.49982
C38	0.89925	0.47464	0.50030	C38	0.89913	0.47454	0.49979

C39	0.47539	0.57646	0.48808	C39	0.47439	0.57570	0.48948
C40	0.52639	0.42578	0.50113	C40	0.52532	0.42476	0.49297
C41	0.42455	0.89921	0.50024	C41	0.42447	0.89939	0.49988
C42	0.57542	0.10084	0.50012	C42	0.57553	0.10098	0.49993
C43	0.52531	0.10079	0.50005	C43	0.52546	0.10099	0.49980
C44	0.47467	0.89924	0.50024	C44	0.47456	0.89937	0.49992
C45	0.57669	0.47554	0.48994	C45	0.57542	0.47482	0.49252
C46	0.42564	0.52621	0.50037	C46	0.42434	0.52564	0.48890
C47	0.89924	0.42453	0.50031	C47	0.89912	0.42447	0.49994
C48	0.10087	0.57544	0.50003	C48	0.10068	0.57556	0.49984
C49	0.49705	0.4966	0.70757	C49	0.50076	0.49968	0.63791
H1	0.14836	0.48853	0.50062	H1	0.14846	0.48885	0.50031
H2	0.85156	0.51129	0.50143	H2	0.85161	0.51141	0.50009
H3	0.51154	0.66085	0.48488	H3	0.51116	0.65996	0.49435
H4	0.48927	0.34132	0.50854	H4	0.48865	0.34043	0.49728
H5	0.34021	0.8516	0.50042	H5	0.34019	0.85176	0.49941
H6	0.65973	0.14852	0.50048	H6	0.65982	0.14869	0.49958
H7	0.48851	0.14833	0.50070	H7	0.48865	0.14856	0.50010
H8	0.51133	0.85156	0.50145	H8	0.51126	0.85171	0.50027
H9	0.66103	0.51157	0.48569	H9	0.65973	0.51148	0.49811
H10	0.34122	0.48920	0.50860	H10	0.34005	0.48887	0.49361
H11	0.85167	0.34019	0.50057	H11	0.85138	0.34019	0.49958
H12	0.14857	0.65975	0.50044	H12	0.14827	0.65984	0.49943
H13	0.46251	0.45783	0.69369	H13	0.47632	0.52227	0.73597
N1	0.24023	0.57201	0.50045	N1	0.24019	0.57235	0.50133
N2	0.75990	0.42784	0.50062	N2	0.75973	0.42797	0.50107

N3	0.42790	0.66846	0.49406	N3	0.42774	0.66827	0.49790
N4	0.57222	0.33225	0.49988	N4	0.57211	0.33214	0.49966
N5	0.33189	0.75974	0.50155	N5	0.33186	0.76000	0.50062
N6	0.66798	0.24025	0.50131	N6	0.66802	0.24038	0.50045
N7	0.57203	0.24022	0.50044	N7	0.57210	0.24042	0.50096
N8	0.42789	0.75986	0.50082	N8	0.42775	0.75991	0.50120
N9	0.66853	0.42788	0.49381	N9	0.66807	0.42806	0.50045
N10	0.33223	0.57217	0.50003	N10	0.33178	0.57235	0.49792
N11	0.75978	0.33183	0.5016	N11	0.75974	0.33204	0.50035
N12	0.24029	0.66798	0.50135	N12	0.24007	0.66822	0.50060
Cu1	0.50370	0.50379	0.51319	Cu1	0.49994	0.50021	0.50333
Cu2	0.50001	0.00002	0.49931	Cu2	0.50004	0.00019	0.49981
Cu3	0.00004	0.50003	0.49931	Cu3	- 0.00008	0.49998	0.49974

Fe ₃ (HATNA) ₂				Fe ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z
O1	0.05300	0.5685	0.49999	O1	0.05262	0.56866	0.50015
O2	0.94705	0.43131	0.50001	O2	0.94738	0.43139	0.50018
O3	0.43338	0.48500	0.51083	O3	0.43184	0.4842	0.48860
O4	0.57021	0.51790	0.49450	O4	0.56892	0.51643	0.48984
O5	0.51572	0.94716	0.50043	O5	0.51573	0.94715	0.50007
O6	0.48408	0.05285	0.49997	O6	0.48428	0.05284	0.50004
O7	0.56850	0.05298	0.50016	O7	0.56863	0.05262	0.50017
O8	0.43130	0.94704	0.49995	O8	0.43137	0.94738	0.50018
O9	0.48507	0.43341	0.51330	O9	0.48435	0.43190	0.48754

O10	0.51794	0.57025	0.49394	O10	0.51640	0.56885	0.49005
O11	0.94717	0.51572	0.50046	O11	0.94714	0.51576	0.50001
O12	0.05285	0.48409	0.49996	O12	0.05283	0.48429	0.50004
O13	0.48873	0.4868	0.7851	O13	0.53124	0.53166	0.67560
O14	0.50999	0.5114	0.64435	O14	0.45587	0.45335	0.65993
C1	0.38287	0.71578	0.49792	C1	0.38250	0.71598	0.50096
C2	0.61691	0.28435	0.49950	C2	0.61748	0.28406	0.50106
C3	0.28436	0.66587	0.49953	C3	0.28402	0.6664	0.50050
C4	0.71560	0.33389	0.49900	C4	0.71598	0.33357	0.50050
C5	0.33414	0.61697	0.49913	C5	0.33380	0.61750	0.50105
C6	0.66615	0.38305	0.49641	C6	0.66632	0.38255	0.50113
C7	0.71576	0.38287	0.49778	C7	0.71598	0.38249	0.50100
C8	0.28437	0.61692	0.49950	C8	0.28405	0.61747	0.50103
C9	0.66587	0.28435	0.49936	C9	0.66640	0.28402	0.50052
C10	0.33390	0.7156	0.49918	C10	0.33357	0.71598	0.50048
C11	0.61697	0.33414	0.49933	C11	0.61752	0.33380	0.50106
C12	0.38307	0.66617	0.49650	C12	0.38255	0.66630	0.50107
C13	0.19453	0.5719	0.50011	C13	0.19429	0.57243	0.50019
C14	0.80552	0.42779	0.49952	C14	0.80570	0.42754	0.50015
C15	0.42862	0.62195	0.49462	C15	0.42777	0.62183	0.49899
C16	0.57238	0.37936	0.50111	C16	0.57258	0.37851	0.49852
C17	0.37826	0.8054	0.50009	C17	0.37811	0.80574	0.49988
C18	0.62138	0.19457	0.50023	C18	0.62185	0.19427	0.49993
C19	0.57190	0.19451	0.50003	C19	0.57242	0.19430	0.50023
C20	0.42779	0.80554	0.49965	C20	0.42755	0.80572	0.50014
C21	0.62190	0.42857	0.49473	C21	0.62188	0.42779	0.49896

C22	0.37939	0.57238	0.50046	C22	0.37851	0.57252	0.49872
C23	0.80537	0.37824	0.49998	C23	0.80573	0.37811	0.49988
C24	0.19460	0.62140	0.50032	C24	0.19427	0.62186	0.49990
C25	0.14684	0.52393	0.50000	C25	0.14676	0.52441	0.49994
C26	0.85317	0.47579	0.50011	C26	0.85321	0.47559	0.49994
C27	0.47675	0.62285	0.49136	C27	0.47600	0.62237	0.49676
C28	0.52473	0.37939	0.50707	C28	0.52449	0.37818	0.49540
C29	0.37754	0.85291	0.50045	C29	0.37752	0.85333	0.49981
C30	0.62218	0.14710	0.50040	C30	0.62247	0.14668	0.49981
C31	0.52392	0.14683	0.49995	C31	0.52440	0.14677	0.49997
C32	0.47580	0.85317	0.50012	C32	0.47559	0.85323	0.49995
C33	0.62282	0.47671	0.49137	C33	0.62245	0.47603	0.49672
C34	0.37938	0.52470	0.50560	C34	0.37816	0.52441	0.49587
C35	0.85291	0.37756	0.50046	C35	0.85333	0.37752	0.4998
C36	0.14712	0.62219	0.50039	C36	0.14668	0.62248	0.49981
C37	0.10073	0.52552	0.49999	C37	0.10058	0.52587	0.49989
C38	0.89931	0.47427	0.50025	C38	0.89941	0.47416	0.4999
C39	0.47609	0.57554	0.49629	C39	0.4747	0.57494	0.49392
C40	0.52639	0.42724	0.50623	C40	0.52603	0.42574	0.4925
C41	0.42501	0.89920	0.50016	C41	0.42500	0.89946	0.49992
C42	0.57474	0.10081	0.50018	C42	0.57501	0.10055	0.49992
C43	0.52552	0.10072	0.50000	C43	0.52586	0.10059	0.49991
C44	0.47426	0.89931	0.50025	C44	0.47415	0.89941	0.49992
C45	0.57552	0.47604	0.49679	C45	0.57504	0.47473	0.49361
C46	0.42723	0.52632	0.50476	C46	0.42570	0.52590	0.49317
C47	0.89919	0.42502	0.50019	C47	0.89946	0.42501	0.49992

C48	0.10083	0.57475	0.50009	C48	0.10054	0.57502	0.49991
C49	0.47986	0.47668	0.70604	C49	0.49801	0.49735	0.63065
H1	0.14700	0.48713	0.50013	H1	0.14707	0.48769	0.49992
H2	0.85285	0.51249	0.50046	H2	0.85283	0.51227	0.49993
H3	0.51323	0.65999	0.48647	H3	0.51264	0.65950	0.49732
H4	0.48796	0.34259	0.51257	H4	0.48771	0.34119	0.49528
H5	0.34031	0.85217	0.50062	H5	0.34038	0.85280	0.50003
H6	0.65944	0.1479	0.50037	H6	0.65961	0.14724	0.50002
H7	0.48713	0.14700	0.50007	H7	0.48770	0.14710	0.49993
H8	0.51251	0.85287	0.50045	H8	0.51227	0.85285	0.49994
H9	0.65993	0.5132	0.48602	H9	0.65957	0.51265	0.49748
H10	0.34256	0.48792	0.51059	H10	0.34116	0.48766	0.49584
H11	0.85215	0.34030	0.50061	H11	0.85279	0.34038	0.50004
H12	0.14796	0.65947	0.50037	H12	0.14723	0.65962	0.50002
H13	0.44743	0.43934	0.67993	H13	0.45725	0.4547	0.72557
N1	0.24000	0.57125	0.49982	N1	0.23979	0.57183	0.50087
N2	0.76011	0.42849	0.49834	N2	0.76023	0.42814	0.5008
N3	0.42877	0.66786	0.49314	N3	0.42836	0.66781	0.50074
N4	0.57151	0.33308	0.50199	N4	0.57180	0.33244	0.50039
N5	0.33236	0.75984	0.50015	N5	0.33216	0.76031	0.49996
N6	0.66730	0.24008	0.49989	N6	0.66780	0.23968	0.50000
N7	0.57125	0.23998	0.49978	N7	0.57182	0.23980	0.50093
N8	0.42849	0.76013	0.49853	N8	0.42816	0.76024	0.50077
N9	0.66780	0.42874	0.49291	N9	0.66785	0.42837	0.50087
N10	0.33310	0.57151	0.50138	N10	0.33244	0.57177	0.50049
N11	0.75983	0.33234	0.49995	N11	0.76031	0.33215	0.49997

N12	0.24010	0.66732	0.50011	N12	0.23969	0.66780	0.49997
Fe1	0.50307	0.50316	0.52244	Fe1	0.50038	0.50032	0.49882
Fe2	0.49990	0.00000	0.50019	Fe2	0.50001	0.00000	0.50016
Fe3	0.00002	0.49991	0.50017	Fe3	- 0.00001	0.50004	0.50014
Mn ₃ (HATNA)				Mn ₃ (HATNA)			
2	coordinates			2	coordinates		
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z
O1	0.05393	0.56935	0.49887	O1	0.05396	0.56968	0.49999
O2	0.94589	0.43032	0.49897	O2	0.9462	0.43042	0.50007
O3	0.43501	0.48734	0.51198	O3	0.43099	0.48443	0.4904
O4	0.57182	0.51834	0.48839	O4	0.569	0.51552	0.49326
O5	0.51568	0.9461	0.50012	O5	0.51577	0.94626	0.49966
O6	0.48398	0.05387	0.49965	O6	0.48421	0.05389	0.49961
O7	0.56934	0.05403	0.49895	O7	0.56961	0.05394	0.49995
O8	0.43032	0.94596	0.4989	O8	0.43036	0.94618	0.50009
O9	0.48744	0.43523	0.51396	O9	0.48451	0.431	0.48868
O10	0.51822	0.57184	0.48732	O10	0.51551	0.56889	0.49358
O11	0.94603	0.51568	0.50024	O11	0.94625	0.51581	0.49966
O12	0.0538	0.48399	0.49958	O12	0.0539	0.48426	0.49968
O13	0.4983	0.49724	0.78375	O13	0.52996	0.53069	0.68323
O14	0.51609	0.51741	0.6404	O14	0.45515	0.45258	0.66573
C1	0.38259	0.71567	0.49831	C1	0.38254	0.71584	0.50143
C2	0.61703	0.28458	0.49995	C2	0.61757	0.28429	0.5015
C3	0.28445	0.66593	0.50074	C3	0.28433	0.66633	0.50125
C4	0.71545	0.33381	0.50032	C4	0.7158	0.33373	0.5013

C5	0.33418	0.61727	0.49883	C5	0.33338	0.6176	0.50055
C6	0.66625	0.38281	0.4951	C6	0.66641	0.38256	0.50086
C7	0.71563	0.38265	0.49817	C7	0.71586	0.38252	0.50154
C8	0.2845	0.61708	0.50009	C8	0.2843	0.61755	0.50144
C9	0.66587	0.28453	0.50052	C9	0.66634	0.28431	0.50131
C10	0.33375	0.71551	0.50054	C10	0.33374	0.71579	0.50123
C11	0.61724	0.33428	0.49894	C11	0.61761	0.33377	0.50054
C12	0.38273	0.66629	0.49501	C12	0.3826	0.6664	0.50072
C13	0.19494	0.57216	0.50067	C13	0.19487	0.57265	0.50056
C14	0.80501	0.42746	0.5008	C14	0.80527	0.4274	0.50049
C15	0.42834	0.62253	0.48993	C15	0.42755	0.62193	0.49661
C16	0.57319	0.37978	0.4999	C16	0.5727	0.37822	0.49546
C17	0.37804	0.80495	0.50137	C17	0.37807	0.8052	0.50029
C18	0.62144	0.19506	0.50087	C18	0.62196	0.1949	0.50031
C19	0.57211	0.19502	0.50054	C19	0.57264	0.19487	0.50057
C20	0.42743	0.80507	0.50093	C20	0.4274	0.80527	0.50048
C21	0.62256	0.4285	0.49069	C21	0.62197	0.42753	0.49642
C22	0.37963	0.57316	0.49899	C22	0.37824	0.57266	0.49593
C23	0.80489	0.37807	0.50124	C23	0.80522	0.37807	0.5003
C24	0.19498	0.6215	0.50098	C24	0.19492	0.62197	0.5003
C25	0.14742	0.5244	0.50041	C25	0.14743	0.52481	0.50008
C26	0.85243	0.47528	0.50116	C26	0.85269	0.47525	0.49999
C27	0.47649	0.62378	0.48404	C27	0.47544	0.62241	0.49488
C28	0.52599	0.38038	0.50764	C28	0.52478	0.37766	0.49179
C29	0.37748	0.85236	0.50087	C29	0.37752	0.8526	0.4998
C30	0.62206	0.14766	0.50046	C30	0.62249	0.1475	0.49977

C31	0.52435	0.14748	0.50034	C31	0.52479	0.14744	0.5001
C32	0.47526	0.85249	0.50119	C32	0.47523	0.8527	0.50001
C33	0.62381	0.47666	0.48499	C33	0.62247	0.47542	0.49463
C34	0.38022	0.52594	0.5062	C34	0.37769	0.52474	0.49281
C35	0.85228	0.37749	0.50085	C35	0.85262	0.37754	0.4998
C36	0.14757	0.6221	0.50045	C36	0.14753	0.62252	0.49977
C37	0.10129	0.52573	0.49992	C37	0.10134	0.52611	0.49976
C38	0.89855	0.47396	0.5006	C38	0.89881	0.47397	0.49972
C39	0.47638	0.57704	0.49113	C39	0.4741	0.57498	0.49345
C40	0.52815	0.42824	0.50554	C40	0.52603	0.42501	0.4907
C41	0.42476	0.89851	0.50004	C41	0.4248	0.89875	0.49982
C42	0.57486	0.10146	0.49973	C42	0.57518	0.10137	0.49979
C43	0.5257	0.10136	0.49994	C43	0.52606	0.10134	0.49974
C44	0.47395	0.89862	0.50055	C44	0.47394	0.89881	0.49974
C45	0.57708	0.47652	0.49221	C45	0.57505	0.47408	0.49274
C46	0.42808	0.52808	0.50411	C46	0.42504	0.52598	0.49195
C47	0.89845	0.42476	0.50009	C47	0.89876	0.42484	0.49982
C48	0.10137	0.57489	0.49968	C48	0.10139	0.57524	0.49979
C49	0.48716	0.48505	0.70594	C49	0.49731	0.49673	0.63702
H1	0.14764	0.48776	0.50048	H1	0.14776	0.48822	0.50014
H2	0.85206	0.51186	0.50124	H2	0.85231	0.51179	0.50006
H3	0.51248	0.66087	0.47651	H3	0.51208	0.65934	0.49564
H4	0.48929	0.34408	0.51581	H4	0.48828	0.34064	0.49116
H5	0.3405	0.85189	0.5008	H5	0.34053	0.85212	0.49961
H6	0.65911	0.14826	0.50049	H6	0.65948	0.14799	0.49952
H7	0.4877	0.14769	0.50041	H7	0.4882	0.14778	0.50017

H8	0.51184	0.85212	0.50128	H8	0.51179	0.85234	0.50006
H9	0.66089	0.51263	0.4773	H9	0.6594	0.51207	0.49582
H10	0.34388	0.48921	0.5142	H10	0.34067	0.48824	0.49217
H11	0.85181	0.3405	0.50079	H11	0.85214	0.34055	0.49961
H12	0.14815	0.65914	0.50045	H12	0.14803	0.65953	0.49955
H13	0.45341	0.44758	0.68383	H13	0.45568	0.45305	0.73136
N1	0.2403	0.57159	0.50032	N1	0.24014	0.57201	0.50118
N2	0.75978	0.42815	0.49926	N2	0.76003	0.42806	0.50116
N3	0.42833	0.66813	0.48884	N3	0.42814	0.66784	0.49896
N4	0.57203	0.33356	0.50194	N4	0.57208	0.33233	0.49796
N5	0.33224	0.75963	0.50188	N5	0.33225	0.7599	0.50065
N6	0.66725	0.24034	0.50118	N6	0.6678	0.24017	0.50071
N7	0.57153	0.24038	0.50018	N7	0.57202	0.24014	0.5012
N8	0.42809	0.75982	0.49941	N8	0.42807	0.76002	0.5011
N9	0.66813	0.42845	0.48922	N9	0.66785	0.4281	0.49907
N10	0.33342	0.57204	0.50143	N10	0.33236	0.57205	0.49817
N11	0.75957	0.33228	0.50165	N11	0.75993	0.33225	0.50066
N12	0.24026	0.66731	0.50138	N12	0.24019	0.6678	0.50069
Mn1	0.50517	0.50533	0.51904	Mn1	0.49985	0.49976	0.50245
Mn2	0.49987	0.99999	0.49927	Mn2	0.49998	0.00007	0.50007
Mn3	0.99992	0.49987	0.49929	Mn3	0.00008	0.50004	0.50009
Ni ₃ (HATNA) ₂				Ni ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z
O1	0.05206	0.56904	0.49918	O1	0.05122	0.56917	0.49972

O2	0.94814	0.43085	0.49906	O2	0.94893	0.43068	0.49973
O3	0.43384	0.48567	0.51123	O3	0.43089	0.48239	0.49194
O4	0.57159	0.51886	0.48276	O4	0.57026	0.51857	0.49011
O5	0.517	0.94828	0.49938	O5	0.51793	0.94888	0.4997
O6	0.48277	0.05205	0.49891	O6	0.48193	0.05135	0.49977
O7	0.569	0.05212	0.49924	O7	0.56913	0.0512	0.49971
O8	0.43082	0.94818	0.49906	O8	0.43069	0.94894	0.49971
O9	0.48564	0.43399	0.51201	O9	0.48245	0.43092	0.49008
O10	0.51871	0.57162	0.48189	O10	0.51853	0.57022	0.48932
O11	0.94825	0.51703	0.49944	O11	0.94887	0.51795	0.4997
O12	0.05198	0.48283	0.49876	O12	0.05136	0.48192	0.49978
O13	0.50179	0.49993	0.77612	O13	0.5352	0.53729	0.67311
O14	0.52001	0.5208	0.63506	O14	0.45922	0.45674	0.66119
C1	0.38287	0.71664	0.49914	C1	0.3829	0.71667	0.50179
C2	0.61708	0.28398	0.50092	C2	0.61723	0.28359	0.50177
C3	0.28375	0.66648	0.5006	C3	0.28347	0.66673	0.50165
C4	0.71642	0.33354	0.50031	C4	0.71668	0.33332	0.50176
C5	0.33383	0.61735	0.50137	C5	0.33356	0.61734	0.50059
C6	0.66698	0.38319	0.4974	C6	0.66682	0.38294	0.50073
C7	0.71659	0.38294	0.49906	C7	0.71668	0.38289	0.50192
C8	0.2839	0.61714	0.50093	C8	0.28359	0.61722	0.50168
C9	0.66644	0.28382	0.50054	C9	0.66674	0.28346	0.50171
C10	0.33346	0.71646	0.50043	C10	0.33333	0.71667	0.50169
C11	0.61732	0.33396	0.50134	C11	0.61735	0.33356	0.50064
C12	0.38307	0.66699	0.49725	C12	0.38295	0.66681	0.50059
C13	0.19359	0.57161	0.50027	C13	0.1931	0.57145	0.50067

C14	0.80677	0.42821	0.50048	C14	0.80713	0.42849	0.50073
C15	0.42907	0.62286	0.49279	C15	0.42868	0.62217	0.49533
C16	0.57278	0.37967	0.50272	C16	0.57194	0.37851	0.49521
C17	0.37817	0.80673	0.50079	C17	0.37817	0.80713	0.50041
C18	0.62148	0.19356	0.50037	C18	0.62173	0.19301	0.50038
C19	0.57156	0.19364	0.50028	C19	0.57146	0.1931	0.5007
C20	0.42817	0.8068	0.50063	C20	0.42848	0.80712	0.50074
C21	0.62283	0.42919	0.49329	C21	0.6222	0.42867	0.4952
C22	0.37953	0.57284	0.50243	C22	0.37851	0.57191	0.4956
C23	0.80669	0.3782	0.50064	C23	0.80715	0.37818	0.50038
C24	0.19349	0.62155	0.5004	C24	0.19301	0.62172	0.50037
C25	0.14604	0.52346	0.49982	C25	0.14559	0.52292	0.50026
C26	0.85421	0.4764	0.50078	C26	0.85463	0.477	0.50024
C27	0.47735	0.62408	0.48697	C27	0.47726	0.62312	0.49322
C28	0.52532	0.37997	0.51065	C28	0.52344	0.3778	0.49341
C29	0.37748	0.8542	0.50075	C29	0.37726	0.85472	0.49986
C30	0.62221	0.14613	0.50037	C30	0.6226	0.14542	0.49984
C31	0.52341	0.14609	0.4999	C31	0.52292	0.14559	0.50028
C32	0.47636	0.85425	0.50087	C32	0.477	0.85464	0.50027
C33	0.6241	0.4775	0.48773	C33	0.62316	0.47727	0.4932
C34	0.37982	0.52538	0.51041	C34	0.37779	0.5234	0.49421
C35	0.85416	0.37752	0.50061	C35	0.85473	0.37726	0.49984
C36	0.14605	0.62224	0.50032	C36	0.14543	0.62262	0.49985
C37	0.09919	0.52467	0.4994	C37	0.09867	0.52429	0.49998
C38	0.90103	0.47522	0.50014	C38	0.90153	0.47561	0.49994
C39	0.47697	0.57648	0.49093	C39	0.4758	0.57496	0.49137

C40	0.52708	0.42818	0.50588	C40	0.52517	0.42605	0.49137
C41	0.42555	0.90104	0.50001	C41	0.42563	0.90159	0.49988
C42	0.57421	0.09924	0.49974	C42	0.57422	0.09857	0.49987
C43	0.52462	0.09926	0.49952	C43	0.52429	0.09866	0.49998
C44	0.47518	0.90107	0.50017	C44	0.47559	0.90154	0.49996
C45	0.5765	0.47713	0.4916	C45	0.575	0.4758	0.49126
C46	0.42801	0.52708	0.50539	C46	0.42604	0.52514	0.49235
C47	0.901	0.4256	0.49995	C47	0.90159	0.42563	0.49988
C48	0.09917	0.57424	0.49966	C48	0.09858	0.57424	0.49988
C49	0.49011	0.48794	0.69742	C49	0.50119	0.50123	0.63141
H1	0.14629	0.48651	0.49992	H1	0.14601	0.48576	0.50028
H2	0.85371	0.51322	0.50097	H2	0.85424	0.51419	0.50025
H3	0.51381	0.66136	0.47963	H3	0.51444	0.66072	0.49339
H4	0.48846	0.34322	0.51949	H4	0.4862	0.34028	0.49394
H5	0.34019	0.85379	0.50108	H5	0.33966	0.85432	0.49945
H6	0.65951	0.14659	0.5007	H6	0.6602	0.1458	0.49946
H7	0.48647	0.14636	0.5	H7	0.48576	0.14603	0.5003
H8	0.51317	0.85373	0.50102	H8	0.5142	0.85425	0.50028
H9	0.66137	0.514	0.4806	H9	0.66077	0.51444	0.49376
H10	0.34311	0.48852	0.51948	H10	0.34028	0.48616	0.49496
H11	0.85375	0.34023	0.50091	H11	0.85433	0.33968	0.49945
H12	0.14649	0.65954	0.50069	H12	0.14582	0.6602	0.49947
H13	0.45543	0.45047	0.67586	H13	0.46027	0.45779	0.72693
N1	0.23946	0.57121	0.50062	N1	0.2391	0.57083	0.50128
N2	0.76103	0.42879	0.49968	N2	0.76118	0.4292	0.50149
N3	0.42899	0.66887	0.49156	N3	0.42938	0.66873	0.498

N4	0.57175	0.33307	0.50468	N4	0.57099	0.33184	0.49803
N5	0.33191	0.76082	0.50108	N5	0.3315	0.76119	0.50084
N6	0.66779	0.23936	0.5005	N6	0.66846	0.2389	0.50083
N7	0.57115	0.23952	0.5006	N7	0.57083	0.23911	0.50136
N8	0.42874	0.76107	0.49978	N8	0.42923	0.76118	0.50142
N9	0.66884	0.42911	0.49198	N9	0.66874	0.42937	0.49813
N10	0.33293	0.57179	0.50463	N10	0.33185	0.57098	0.49824
N11	0.76077	0.33197	0.50088	N11	0.76121	0.33151	0.50081
N12	0.23931	0.66784	0.5005	N12	0.2389	0.66844	0.50082
Ni1	0.50402	0.50414	0.51035	Ni1	0.50061	0.50058	0.50131
Ni2	0.49989	0.00017	0.49889	Ni2	0.4999	0.00008	0.49965
Ni3	0.00012	0.49994	0.49888	Ni3	0.00009	0.49992	0.49967

Pd ₃ (HATNA) ₂				Pd ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z
O1	0.05701	0.5732	0.5002	O1	0.05753	0.57277	0.49995
O2	0.943	0.42683	0.5002	O2	0.94251	0.4272	0.50001
O3	0.42628	0.48306	0.49647	O3	0.42659	0.48435	0.48743
O4	0.57244	0.51506	0.48241	O4	0.57261	0.5153	0.49409
O5	0.51642	0.94322	0.50007	O5	0.51522	0.94253	0.49982
O6	0.48362	0.05688	0.50007	O6	0.48473	0.05757	0.4997
O7	0.57319	0.05704	0.50019	O7	0.57277	0.05753	0.49996
O8	0.42683	0.94303	0.50021	O8	0.42719	0.94254	0.49999
O9	0.48312	0.42622	0.49502	O9	0.48443	0.42663	0.48661
O10	0.5152	0.57244	0.48461	O10	0.51527	0.57259	0.49393

O11	0.9432	0.51643	0.50008	O11	0.94252	0.51524	0.49984
O12	0.05687	0.48363	0.50007	O12	0.05755	0.48473	0.4997
O13	0.51788	0.52606	0.78642	O13	0.52461	0.52594	0.6825
O14	0.52496	0.52297	0.6408	O14	0.45061	0.4492	0.6551
C1	0.38233	0.71555	0.50287	C1	0.38201	0.71557	0.50103
C2	0.61778	0.28441	0.50258	C2	0.61806	0.28454	0.50133
C3	0.2845	0.66657	0.50126	C3	0.28449	0.66665	0.50073
C4	0.7156	0.3336	0.50118	C4	0.71557	0.33344	0.50062
C5	0.33333	0.6177	0.50303	C5	0.3335	0.61823	0.50081
C6	0.66644	0.38225	0.5033	C6	0.66658	0.38193	0.50087
C7	0.71556	0.38234	0.50276	C7	0.71555	0.38202	0.50103
C8	0.28442	0.61779	0.50272	C8	0.28451	0.61807	0.5013
C9	0.66656	0.2845	0.50113	C9	0.66664	0.28451	0.50074
C10	0.33359	0.71561	0.5013	C10	0.33343	0.71558	0.50064
C11	0.6177	0.33333	0.50311	C11	0.61822	0.33351	0.50083
C12	0.38225	0.66642	0.50315	C12	0.38191	0.66659	0.50082
C13	0.1956	0.57297	0.49974	C13	0.19592	0.5735	0.50039
C14	0.80445	0.42723	0.49975	C14	0.80414	0.42655	0.50019
C15	0.42678	0.62201	0.49882	C15	0.42643	0.62257	0.49788
C16	0.57271	0.37722	0.49932	C16	0.57377	0.37753	0.49704
C17	0.37772	0.80445	0.49915	C17	0.37751	0.80416	0.49992
C18	0.62244	0.19564	0.49918	C18	0.62249	0.19592	0.49997
C19	0.57294	0.19561	0.49972	C19	0.57349	0.19594	0.5004
C20	0.4272	0.80446	0.49978	C20	0.42653	0.80415	0.50021
C21	0.62203	0.42678	0.4992	C21	0.62257	0.42644	0.49791
C22	0.37721	0.57269	0.499	C22	0.37751	0.57375	0.49711

C23	0.80443	0.37774	0.49919	C23	0.80414	0.37752	0.4999
C24	0.19562	0.62246	0.49915	C24	0.1959	0.62252	0.49997
C25	0.14887	0.52548	0.49946	C25	0.14932	0.52642	0.49995
C26	0.85126	0.47468	0.49944	C26	0.85073	0.47363	0.49987
C27	0.47407	0.62262	0.49544	C27	0.47357	0.62271	0.49718
C28	0.52499	0.37598	0.49767	C28	0.52656	0.37715	0.49432
C29	0.37686	0.85108	0.49975	C29	0.37698	0.85077	0.49968
C30	0.62324	0.14899	0.49979	C30	0.62296	0.1493	0.49969
C31	0.52545	0.14887	0.49947	C31	0.52641	0.14935	0.49995
C32	0.47466	0.85126	0.49944	C32	0.47361	0.85076	0.49988
C33	0.62266	0.47408	0.49549	C33	0.62272	0.47358	0.49724
C34	0.376	0.52496	0.49766	C34	0.37712	0.52652	0.49453
C35	0.85105	0.37687	0.49979	C35	0.85074	0.377	0.49969
C36	0.14896	0.62326	0.49976	C36	0.14929	0.62298	0.49967
C37	0.1024	0.52635	0.4998	C37	0.10292	0.52698	0.49968
C38	0.89768	0.4737	0.49979	C38	0.89715	0.47302	0.49973
C39	0.47273	0.57507	0.4918	C39	0.47258	0.57578	0.49485
C40	0.52566	0.42315	0.49476	C40	0.52731	0.42388	0.49199
C41	0.42418	0.89763	0.50002	C41	0.42402	0.89715	0.49971
C42	0.57586	0.10243	0.50005	C42	0.57592	0.10288	0.49973
C43	0.52634	0.10241	0.49981	C43	0.52697	0.10293	0.49969
C44	0.4737	0.8977	0.49977	C44	0.47299	0.89715	0.49972
C45	0.57514	0.47272	0.49097	C45	0.57582	0.47261	0.49472
C46	0.42319	0.52563	0.49543	C46	0.42386	0.52726	0.49242
C47	0.8976	0.42418	0.50004	C47	0.89713	0.42403	0.49973
C48	0.10241	0.57587	0.50004	C48	0.10288	0.57592	0.4997

C49	0.49854	0.50416	0.71474	C49	0.49324	0.4933	0.63469
H1	0.14915	0.48886	0.49965	H1	0.14963	0.49017	0.49997
H2	0.85106	0.51134	0.49965	H2	0.85038	0.50986	0.49991
H3	0.51093	0.65938	0.4945	H3	0.50992	0.65914	0.49811
H4	0.48848	0.33895	0.49798	H4	0.49038	0.34057	0.49309
H5	0.33992	0.85068	0.50018	H5	0.3404	0.85043	0.49978
H6	0.66017	0.14935	0.50015	H6	0.65951	0.1496	0.49976
H7	0.48883	0.14914	0.49966	H7	0.49015	0.14964	0.49997
H8	0.51131	0.85107	0.49964	H8	0.50984	0.8504	0.49991
H9	0.6594	0.51091	0.49482	H9	0.65915	0.50994	0.49839
H10	0.33895	0.48845	0.4977	H10	0.34055	0.49035	0.4933
H11	0.85063	0.33993	0.50017	H11	0.85038	0.34041	0.49977
H12	0.14929	0.66018	0.50016	H12	0.14956	0.65952	0.49974
H13	0.45892	0.46953	0.70903	H13	0.44773	0.44667	0.72051
N1	0.24069	0.57219	0.50145	N1	0.24096	0.57303	0.50125
N2	0.75929	0.42796	0.50147	N2	0.75913	0.42705	0.50084
N3	0.42758	0.66794	0.50083	N3	0.42704	0.66801	0.49973
N4	0.57219	0.3315	0.50107	N4	0.57308	0.33207	0.49904
N5	0.33176	0.75931	0.49893	N5	0.33199	0.75915	0.50007
N6	0.66838	0.24082	0.49895	N6	0.66804	0.24091	0.50007
N7	0.57215	0.24069	0.50133	N7	0.57302	0.24099	0.50125
N8	0.42792	0.75929	0.50159	N8	0.42704	0.75915	0.50085
N9	0.66796	0.42759	0.50141	N9	0.66801	0.42706	0.49985
N10	0.3315	0.57219	0.50064	N10	0.33207	0.57308	0.49904
N11	0.7593	0.33177	0.49893	N11	0.75913	0.332	0.50004
N12	0.24081	0.66839	0.49894	N12	0.24089	0.66806	0.50009

Pd1	0.49987	0.49973	0.50067	Pd1	0.49941	0.49936	0.49857
Pd2	0.50001	0.00003	0.50014	Pd2	0.49998	0.00004	0.49995
Pd3	0.00001	0.50002	0.50014	Pd3	0.00002	0.49998	0.49996
Cr ₃ (HATNA) ₂	coordinates			Cr ₃ (HATNA) ₂	coordinates		
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z
O1	0.0546	0.56931	0.50494	O1	0.05453	0.56965	0.49953
O2	0.94437	0.42993	0.50245	O2	0.94557	0.43011	0.49933
O3	0.43529	0.4874	0.5146	O3	0.43146	0.48471	0.49473
O4	0.56827	0.51761	0.50385	O4	0.56897	0.51553	0.49646
O5	0.51546	0.94608	0.50259	O5	0.51544	0.94571	0.49988
O6	0.48402	0.05479	0.50025	O6	0.48434	0.05442	0.50006
O7	0.56949	0.05551	0.50198	O7	0.56961	0.05447	0.49947
O8	0.43009	0.94567	0.50527	O8	0.43005	0.94548	0.49947
O9	0.48633	0.43502	0.53459	O9	0.48484	0.43147	0.49272
O10	0.51831	0.57187	0.50746	O10	0.51556	0.5689	0.49743
O11	0.94536	0.51553	0.50074	O11	0.94574	0.51544	0.49981
O12	0.05424	0.48406	0.50199	O12	0.05445	0.48435	0.50007
O13	0.5063	0.48783	0.80365	O13	0.53034	0.52955	0.69334
O14	0.50662	0.51162	0.66117	O14	0.45474	0.45262	0.67688
C1	0.38275	0.71557	0.49008	C1	0.38244	0.71544	0.50007
C2	0.61627	0.28561	0.4975	C2	0.61769	0.28466	0.4997
C3	0.28502	0.66572	0.49338	C3	0.28469	0.66605	0.50092
C4	0.71415	0.33511	0.49529	C4	0.71542	0.33394	0.50126
C5	0.33471	0.61749	0.48949	C5	0.33405	0.61765	0.497

C6	0.66503	0.38376	0.49338	C6	0.66618	0.38246	0.49762
C7	0.71448	0.38369	0.49369	C7	0.71548	0.38237	0.50025
C8	0.28506	0.61725	0.49158	C8	0.28468	0.61765	0.49961
C9	0.66475	0.28577	0.49619	C9	0.66609	0.28464	0.50113
C10	0.33424	0.71527	0.49311	C10	0.33399	0.71536	0.50103
C11	0.61645	0.33523	0.49886	C11	0.61771	0.33401	0.4967
C12	0.38301	0.66624	0.48731	C12	0.3825	0.66612	0.49774
C13	0.19569	0.57246	0.49542	C13	0.19553	0.57291	0.50079
C14	0.80383	0.42804	0.49566	C14	0.80465	0.42705	0.50102
C15	0.42864	0.62256	0.48693	C15	0.42735	0.62178	0.49331
C16	0.57211	0.38016	0.50608	C16	0.573	0.37846	0.49034
C17	0.37819	0.8045	0.49778	C17	0.37814	0.8045	0.50089
C18	0.62076	0.19656	0.49765	C18	0.62181	0.19551	0.50102
C19	0.57176	0.19627	0.49728	C19	0.57292	0.1955	0.50091
C20	0.4272	0.80479	0.49525	C20	0.42709	0.80461	0.50084
C21	0.62066	0.42874	0.49452	C21	0.62191	0.42735	0.49234
C22	0.38008	0.57344	0.49094	C22	0.37847	0.57288	0.49169
C23	0.80338	0.37892	0.49696	C23	0.80457	0.37811	0.501
C24	0.19577	0.62137	0.49754	C24	0.19556	0.6218	0.50092
C25	0.14775	0.52463	0.49673	C25	0.14781	0.52501	0.50088
C26	0.85193	0.47568	0.49654	C26	0.85241	0.47491	0.50085
C27	0.47699	0.62366	0.48825	C27	0.47536	0.62214	0.49303
C28	0.52486	0.38037	0.51804	C28	0.52508	0.37825	0.48719
C29	0.3778	0.85217	0.50164	C29	0.37772	0.85212	0.50036
C30	0.62141	0.14902	0.49911	C30	0.62209	0.14781	0.50043
C31	0.52409	0.14822	0.49714	C31	0.52501	0.14778	0.50096

C32	0.47499	0.85269	0.497	C32	0.47493	0.85239	0.50073
C33	0.62086	0.47666	0.49011	C33	0.62226	0.47537	0.49193
C34	0.38064	0.52587	0.49677	C34	0.37819	0.52492	0.48926
C35	0.85083	0.37814	0.4992	C35	0.8522	0.37772	0.50032
C36	0.14809	0.6217	0.5012	C36	0.14788	0.62213	0.50043
C37	0.10169	0.52573	0.50024	C37	0.1018	0.52615	0.50047
C38	0.89776	0.47409	0.499	C38	0.89835	0.47367	0.50026
C39	0.47647	0.57713	0.49847	C39	0.47407	0.57499	0.49352
C40	0.52659	0.42785	0.5189	C40	0.5264	0.42539	0.48969
C41	0.42477	0.89837	0.50275	C41	0.42473	0.89819	0.49999
C42	0.5746	0.10273	0.50005	C42	0.57504	0.10182	0.50009
C43	0.52557	0.10233	0.49889	C43	0.52615	0.10178	0.50048
C44	0.47375	0.89864	0.50077	C44	0.47367	0.89831	0.50027
C45	0.57444	0.47585	0.50267	C45	0.57512	0.47409	0.49209
C46	0.42819	0.52823	0.50256	C46	0.42539	0.52625	0.49166
C47	0.89721	0.42493	0.50028	C47	0.89826	0.42475	0.49992
C48	0.10191	0.57468	0.5023	C48	0.10185	0.57504	0.50011
C49	0.49598	0.47564	0.72626	C49	0.49719	0.49615	0.64659
H1	0.14807	0.48812	0.49527	H1	0.14821	0.48855	0.50093
H2	0.85201	0.51238	0.49565	H2	0.85211	0.51143	0.50093
H3	0.51309	0.66078	0.48586	H3	0.5118	0.65896	0.49472
H4	0.48876	0.34386	0.52788	H4	0.48861	0.34139	0.48549
H5	0.34082	0.85148	0.50344	H5	0.34078	0.85157	0.50011
H6	0.65851	0.14989	0.49947	H6	0.65898	0.14826	0.50008
H7	0.48738	0.14815	0.49659	H7	0.48856	0.14818	0.501
H8	0.51148	0.85236	0.49534	H8	0.51146	0.85211	0.5008

H9	0.65736	0.51272	0.48006	H9	0.65908	0.5118	0.49402
H10	0.34408	0.4892	0.50013	H10	0.34136	0.48848	0.48788
H11	0.84983	0.34099	0.50023	H11	0.85167	0.3408	0.50003
H12	0.14874	0.65868	0.50287	H12	0.14835	0.65901	0.5001
H13	0.47695	0.43521	0.7006	H13	0.45621	0.45374	0.74249
N1	0.24068	0.5717	0.49247	N1	0.24044	0.57209	0.50014
N2	0.75899	0.4291	0.4939	N2	0.75976	0.42792	0.50067
N3	0.42867	0.66797	0.4847	N3	0.42803	0.66745	0.49591
N4	0.57133	0.33428	0.50605	N4	0.57225	0.33275	0.49259
N5	0.33267	0.7594	0.49663	N5	0.33253	0.75954	0.50138
N6	0.66629	0.24163	0.49668	N6	0.66748	0.24044	0.50164
N7	0.57081	0.2412	0.49759	N7	0.57212	0.24042	0.50025
N8	0.42819	0.75998	0.49128	N8	0.42796	0.75971	0.50045
N9	0.66621	0.42916	0.48922	N9	0.66755	0.42801	0.4955
N10	0.33407	0.57224	0.49097	N10	0.33279	0.57217	0.49358
N11	0.75822	0.33346	0.49656	N11	0.75959	0.33248	0.50156
N12	0.24075	0.66698	0.49626	N12	0.24049	0.66747	0.50144
Cr1	0.50336	0.50509	0.54138	Cr1	0.50017	0.50005	0.51016
Cr2	0.49985	0.00052	0.50403	Cr2	0.49982	0.00002	0.49953
Cr3	0.99963	0.49959	0.50392	Cr3	0.00008	0.49986	0.4995
Cr ₃ (HATNA) ₂ coordinates				Cr ₃ (HATNA) ₂ coordinates			
*HCOOH	x	y	z	*OCH ₂ O	x	y	z
O1	0.05427	0.56947	0.50429	O1	0.05534	0.56909	0.50192
O2	0.94496	0.43002	0.50164	O2	0.94421	0.42948	0.50038

O3	0.43323	0.48814	0.51858	O3	0.43648	0.4884	0.51091
O4	0.57073	0.51734	0.5057	O4	0.57069	0.52039	0.49045
O5	0.51525	0.9463	0.50115	O5	0.51448	0.94696	0.49878
O6	0.48371	0.05489	0.50108	O6	0.4831	0.05605	0.50078
O7	0.56926	0.05514	0.50167	O7	0.56845	0.05669	0.50011
O8	0.42965	0.94595	0.50437	O8	0.42871	0.94541	0.50279
O9	0.48704	0.43374	0.53255	O9	0.48742	0.43798	0.52123
O10	0.51724	0.57278	0.50667	O10	0.51941	0.57236	0.48552
O11	0.94555	0.51568	0.50064	O11	0.94587	0.51536	0.49928
O12	0.05419	0.48408	0.501	O12	0.05472	0.48372	0.49847
O13	0.50379	0.4843	0.80653	O13	0.50253	0.461	0.84913
O14	0.50936	0.51152	0.66537	O14	0.51437	0.51962	0.64183
C1	0.38204	0.71617	0.49062	C1	0.38339	0.7159	0.49134
C2	0.61716	0.28519	0.49691	C2	0.61619	0.2871	0.49906
C3	0.28436	0.66637	0.4939	C3	0.2855	0.66564	0.49654
C4	0.71495	0.33444	0.49522	C4	0.71423	0.33601	0.49591
C5	0.33396	0.61821	0.4892	C5	0.33537	0.61768	0.49291
C6	0.66594	0.38306	0.49257	C6	0.66572	0.38524	0.49347
C7	0.71523	0.38292	0.49299	C7	0.71486	0.38477	0.49386
C8	0.28449	0.61802	0.49145	C8	0.28574	0.61723	0.49508
C9	0.66553	0.28518	0.49604	C9	0.66458	0.28688	0.49712
C10	0.33355	0.71588	0.49373	C10	0.33466	0.71532	0.4958
C11	0.61731	0.33462	0.49845	C11	0.61671	0.33679	0.5
C12	0.38235	0.66701	0.48774	C12	0.38382	0.66676	0.48756
C13	0.19528	0.57297	0.49585	C13	0.19628	0.57211	0.49692
C14	0.80439	0.42754	0.49534	C14	0.80423	0.42856	0.49487

C15	0.42781	0.62334	0.48765	C15	0.42945	0.62302	0.48142
C16	0.5732	0.37953	0.507	C16	0.57285	0.38237	0.50386
C17	0.37767	0.80502	0.49813	C17	0.37813	0.80459	0.49835
C18	0.62121	0.19604	0.49761	C18	0.62019	0.19762	0.49823
C19	0.57231	0.19601	0.49719	C19	0.57126	0.19764	0.49903
C20	0.42667	0.80527	0.49544	C20	0.42738	0.80528	0.49528
C21	0.62185	0.42813	0.49475	C21	0.62198	0.43091	0.49088
C22	0.37904	0.57411	0.49121	C22	0.38086	0.57373	0.49213
C23	0.80409	0.3785	0.49686	C23	0.80345	0.37925	0.49647
C24	0.19521	0.62182	0.49824	C24	0.19624	0.62104	0.49879
C25	0.14759	0.525	0.49691	C25	0.14834	0.52419	0.49653
C26	0.85222	0.47532	0.49639	C26	0.85253	0.47605	0.49558
C27	0.47589	0.62442	0.48977	C27	0.47744	0.62391	0.47575
C28	0.52623	0.37982	0.5201	C28	0.52594	0.38323	0.51432
C29	0.37741	0.85267	0.50149	C29	0.37714	0.85184	0.50096
C30	0.62146	0.14838	0.49901	C30	0.62068	0.1501	0.49873
C31	0.52444	0.14827	0.49773	C31	0.52342	0.14963	0.49948
C32	0.47454	0.853	0.49667	C32	0.47494	0.85351	0.49588
C33	0.6224	0.47594	0.49162	C33	0.62271	0.4788	0.48412
C34	0.37927	0.5268	0.4987	C34	0.38167	0.5267	0.50069
C35	0.85166	0.37806	0.49889	C35	0.85062	0.37811	0.49827
C36	0.14749	0.62191	0.50142	C36	0.1487	0.62136	0.50073
C37	0.1015	0.52594	0.49999	C37	0.10223	0.52529	0.4983
C38	0.89813	0.47401	0.49885	C38	0.89817	0.47415	0.49776
C39	0.47542	0.57784	0.49994	C39	0.47748	0.57754	0.48535
C40	0.52771	0.42717	0.51986	C40	0.52776	0.43074	0.51036

C41	0.42444	0.89874	0.50222	C41	0.42393	0.89848	0.50083
C42	0.57445	0.10236	0.50005	C42	0.57366	0.1038	0.49963
C43	0.52552	0.10224	0.49948	C43	0.52464	0.10357	0.49993
C44	0.47342	0.89896	0.50002	C44	0.47321	0.89925	0.49841
C45	0.57602	0.47549	0.50455	C45	0.57627	0.4787	0.49362
C46	0.42674	0.5288	0.50564	C46	0.42928	0.52872	0.49919
C47	0.89781	0.42498	0.49979	C47	0.89732	0.42481	0.4988
C48	0.10154	0.57482	0.50212	C48	0.10243	0.57428	0.50043
C49	0.49635	0.47571	0.72006	C49	0.47598	0.44966	0.7823
H1	0.14807	0.48857	0.49519	H1	0.14861	0.48768	0.49486
H2	0.85196	0.51185	0.49534	H2	0.85277	0.51282	0.49466
H3	0.51205	0.66149	0.48645	H3	0.51335	0.6608	0.46745
H4	0.48999	0.3433	0.52933	H4	0.48969	0.34715	0.52598
H5	0.3406	0.85238	0.50311	H5	0.33995	0.85072	0.50301
H6	0.65828	0.14872	0.49949	H6	0.65764	0.1507	0.49841
H7	0.48795	0.14863	0.4974	H7	0.48682	0.14977	0.49975
H8	0.51101	0.85262	0.49474	H8	0.51168	0.85366	0.49403
H9	0.65893	0.51201	0.48124	H9	0.65945	0.51462	0.47403
H10	0.34266	0.49014	0.502	H10	0.34546	0.49028	0.51063
H11	0.85117	0.34117	0.49993	H11	0.84943	0.34087	0.4994
H12	0.14775	0.65868	0.5028	H12	0.14922	0.65826	0.5023
H13	0.47795	0.43445	0.70168	H13	0.48013	0.42707	0.72661
H14	0.52134	0.52191	0.81811	H14	0.4457	0.46103	0.77304
N1	0.24032	0.57239	0.49247	N1	0.24137	0.57156	0.49537
N2	0.75952	0.42845	0.49321	N2	0.75963	0.43003	0.49322
N3	0.42795	0.66884	0.48541	N3	0.42927	0.6684	0.47996

N4	0.57225	0.33359	0.50636	N4	0.57177	0.33637	0.50637
N5	0.33204	0.75999	0.49725	N5	0.33276	0.75917	0.49892
N6	0.66689	0.24097	0.4967	N6	0.66586	0.24268	0.497
N7	0.57157	0.241	0.49699	N7	0.57057	0.24269	0.4996
N8	0.42756	0.76045	0.49165	N8	0.42869	0.76062	0.49161
N9	0.66737	0.42843	0.48852	N9	0.66728	0.4307	0.48733
N10	0.333	0.57299	0.4902	N10	0.33487	0.57264	0.49571
N11	0.75906	0.33291	0.49681	N11	0.75803	0.33393	0.49679
N12	0.24008	0.66755	0.49724	N12	0.24126	0.66678	0.49866
Cr1	0.50318	0.50457	0.53287	Cr1	0.50658	0.50875	0.53719
Cr2	0.49946	0.00058	0.50318	Cr2	0.49854	0.00128	0.50116
Cr3	0.99975	0.49973	0.50303	Cr3	0.00003	0.49922	0.50075

Cr₃(HATNA)₂

coordinates

*H₂COOH

x

y

z

O1	0.05487	0.56951	0.50403
O2	0.94462	0.43018	0.50108
O3	0.43565	0.48681	0.50874
O4	0.56738	0.51722	0.50232
O5	0.51515	0.94622	0.50015
O6	0.48371	0.05500	0.50108
O7	0.56909	0.05546	0.50072
O8	0.42966	0.94560	0.50400
O9	0.48606	0.43461	0.53523
O10	0.51845	0.57201	0.51149

Cr₃(HATNA)₂

coordinates

*CHO

x

y

z

O1	0.05442	0.56980	0.50025
O2	0.94549	0.43017	0.50027
O3	0.43083	0.48447	0.48996
O4	0.56915	0.51567	0.49310
O5	0.51552	0.94563	0.49971
O6	0.48445	0.05439	0.49976
O7	0.56981	0.0545	0.50023
O8	0.43017	0.94557	0.50022
O9	0.48436	0.43085	0.49345
O10	0.51558	0.56924	0.49037

O11	0.94555	0.51572	0.49981	O11	0.94561	0.51554	0.49979
O12	0.05435	0.48412	0.5002	O12	0.05435	0.48447	0.49972
O13	0.49439	0.49216	0.81026	O13	0.51634	0.48543	0.68832
O14	0.50364	0.51058	0.65945	C1	0.38227	0.7155	0.50166
C1	0.38286	0.71558	0.49102	C2	0.61768	0.28458	0.50129
C2	0.61654	0.28578	0.49752	C3	0.28453	0.66614	0.50112
C3	0.28518	0.6656	0.49438	C4	0.71541	0.33389	0.50085
C4	0.71435	0.33523	0.49506	C5	0.33386	0.6177	0.50094
C5	0.33491	0.61742	0.49165	C6	0.66607	0.38234	0.50086
C6	0.6652	0.38396	0.49364	C7	0.71542	0.38232	0.50128
C7	0.71465	0.38383	0.49342	C8	0.2845	0.61772	0.50165
C8	0.28525	0.61714	0.49275	C9	0.66611	0.28459	0.50086
C9	0.66495	0.28587	0.49604	C10	0.33385	0.71546	0.50111
C10	0.33433	0.71519	0.49396	C11	0.61766	0.33393	0.50089
C11	0.61666	0.33538	0.49926	C12	0.38231	0.66615	0.50099
C12	0.38317	0.66626	0.48979	C13	0.19534	0.57301	0.5007
C13	0.19585	0.57235	0.49557	C14	0.80459	0.42701	0.50054
C14	0.80403	0.42813	0.49487	C15	0.42707	0.6218	0.4967
C15	0.42887	0.62266	0.49097	C16	0.57288	0.37829	0.49824
C16	0.57214	0.38013	0.50679	C17	0.37805	0.8046	0.50005
C17	0.37807	0.80443	0.49755	C18	0.6219	0.19545	0.50002
C18	0.62082	0.19661	0.49745	C19	0.57297	0.1954	0.50052
C19	0.57187	0.19645	0.49762	C20	0.42698	0.80466	0.5007
C20	0.42711	0.80483	0.49451	C21	0.62172	0.42712	0.49816
C21	0.62063	0.42882	0.49514	C22	0.37821	0.57291	0.49659
C22	0.38032	0.57338	0.49367	C23	0.80454	0.37808	0.50003

C23	0.80361	0.37903	0.49632	C24	0.1954	0.62194	0.50005
C24	0.19595	0.62125	0.49795	C25	0.14763	0.52512	0.5001
C25	0.14786	0.52454	0.49619	C26	0.85232	0.47491	0.50007
C26	0.85211	0.47577	0.49574	C27	0.475	0.62207	0.49315
C27	0.47713	0.62374	0.49317	C28	0.52493	0.37806	0.49561
C28	0.52483	0.38017	0.51866	C29	0.37773	0.85225	0.49948
C29	0.37751	0.85204	0.50104	C30	0.62223	0.1478	0.49954
C30	0.62126	0.14895	0.4985	C31	0.52507	0.14766	0.50004
C31	0.5241	0.14849	0.49835	C32	0.47487	0.85236	0.50009
C32	0.47483	0.85284	0.4956	C33	0.62197	0.47509	0.49539
C33	0.62057	0.47665	0.49072	C34	0.37796	0.525	0.49285
C34	0.38095	0.52575	0.49781	C35	0.8522	0.37776	0.49955
C35	0.8511	0.3783	0.49831	C36	0.14775	0.62226	0.49948
C36	0.14833	0.62169	0.5012	C37	0.10167	0.52631	0.49966
C37	0.10185	0.52577	0.49927	C38	0.89827	0.47372	0.49971
C38	0.89796	0.47424	0.49807	C39	0.47379	0.57502	0.49097
C39	0.47657	0.57706	0.50153	C40	0.52614	0.42514	0.49433
C40	0.52628	0.42757	0.519	C41	0.42479	0.89826	0.49969
C41	0.42442	0.89833	0.50161	C42	0.57518	0.1018	0.49973
C42	0.57434	0.10276	0.49962	C43	0.52628	0.10172	0.49967
C43	0.52537	0.10249	0.49961	C44	0.47369	0.89832	0.49964
C44	0.47347	0.89873	0.49907	C45	0.57489	0.4739	0.49413
C45	0.57399	0.47564	0.50235	C46	0.42504	0.52626	0.49078
C46	0.42841	0.52798	0.50215	C47	0.8982	0.42482	0.49976
C47	0.89744	0.42512	0.49916	C48	0.10173	0.5752	0.4997
C48	0.10211	0.57474	0.50177	C49	0.49727	0.50278	0.63829

C49	0.4951	0.4724	0.72644	H1	0.14796	0.48863	0.49996
H1	0.148	0.48796	0.49448	H2	0.85201	0.51142	0.49993
H2	0.85218	0.51247	0.49486	H3	0.51143	0.65894	0.49286
H3	0.51332	0.66084	0.49241	H4	0.48846	0.34121	0.4953
H4	0.48885	0.3436	0.52916	H5	0.34083	0.85176	0.49969
H5	0.34049	0.85131	0.50281	H6	0.65912	0.14829	0.49977
H6	0.65824	0.14958	0.4984	H7	0.48858	0.148	0.49989
H7	0.48749	0.14859	0.49851	H8	0.51136	0.85205	0.49993
H8	0.51143	0.85275	0.49382	H9	0.65882	0.51156	0.49493
H9	0.65705	0.51283	0.48096	H10	0.34109	0.48858	0.49237
H10	0.34436	0.48906	0.50001	H11	0.8517	0.34086	0.49977
H11	0.85029	0.34124	0.49928	H12	0.14823	0.65916	0.49969
H12	0.14895	0.65865	0.50272	H13	0.47554	0.52243	0.66221
H13	0.45665	0.43807	0.7152	N1	0.24025	0.57218	0.50168
H14	0.52957	0.51926	0.82526	N2	0.7597	0.42786	0.50132
H15	0.526	0.46224	0.71974	N3	0.42786	0.6675	0.4995
N1	0.24085	0.5716	0.49301	N4	0.57208	0.33261	0.50006
N2	0.75918	0.42921	0.49319	N5	0.33244	0.75966	0.50042
N3	0.42887	0.66808	0.48881	N6	0.66751	0.24038	0.50032
N4	0.57152	0.33429	0.50708	N7	0.57214	0.2403	0.50131
N5	0.33261	0.75925	0.49702	N8	0.42781	0.75976	0.50169
N6	0.66639	0.24166	0.49626	N9	0.6674	0.42792	0.49994
N7	0.57105	0.24144	0.4977	N10	0.33251	0.57213	0.49935
N8	0.42823	0.76007	0.49106	N11	0.75961	0.33246	0.50033
N9	0.66628	0.42933	0.49003	N12	0.24033	0.66756	0.50043
N10	0.3343	0.57217	0.4934	Cr1	0.49999	0.50006	0.50186

N11	0.75843	0.33359	0.49623	Cr2	0.49998	0.00004	0.50041
N12	0.24092	0.66686	0.49701	Cr3	0.99995	0.49999	0.50041
Cr1	0.50281	0.50466	0.54294				
Cr2	0.49939	0.00056	0.50245				
Cr3	0.99986	0.49982	0.50246				
Cr ₃ (HATNA) ₂				Cr ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*OCH ₂	x	y	z	*OCH ₃	x	y	z
O1	0.05458	0.57014	0.50333	O1	0.05518	0.56935	0.50225
O2	0.94572	0.43046	0.49901	O2	0.94452	0.43022	0.49948
O3	0.43291	0.48747	0.51921	O3	0.43578	0.48674	0.50044
O4	0.57118	0.51703	0.4992	O4	0.56613	0.51645	0.49699
O5	0.51544	0.94627	0.49843	O5	0.51516	0.94655	0.49894
O6	0.48442	0.05499	0.50269	O6	0.48358	0.05528	0.50126
O7	0.56979	0.05497	0.49841	O7	0.56892	0.0557	0.49971
O8	0.42996	0.94613	0.50344	O8	0.42955	0.94564	0.50324
O9	0.48696	0.43313	0.52036	O9	0.48472	0.43349	0.52801
O10	0.51701	0.57201	0.5052	O10	0.51853	0.57187	0.5126
O11	0.94592	0.51596	0.49794	O11	0.94573	0.51591	0.49912
O12	0.05458	0.48474	0.49846	O12	0.0545	0.48391	0.4989
O13	0.50639	0.50506	0.65686	O13	0.50067	0.50605	0.65575
C1	0.38224	0.71625	0.49136	C1	0.38319	0.71576	0.49295
C2	0.61795	0.28505	0.49692	C2	0.61649	0.28596	0.49815
C3	0.28462	0.66669	0.49367	C3	0.28548	0.66561	0.4958
C4	0.71569	0.33431	0.4945	C4	0.71427	0.33559	0.49607

C5	0.3341	0.61838	0.49462	C5	0.33534	0.61761	0.49124
C6	0.66655	0.38286	0.49112	C6	0.66495	0.38418	0.49337
C7	0.71583	0.38273	0.49231	C7	0.71452	0.38419	0.49418
C8	0.2847	0.61832	0.49359	C8	0.28563	0.61719	0.49354
C9	0.66633	0.28503	0.49564	C9	0.66492	0.28613	0.49696
C10	0.33379	0.7161	0.49302	C10	0.33459	0.71528	0.49553
C11	0.61792	0.33438	0.49623	C11	0.61646	0.33547	0.49855
C12	0.38253	0.6671	0.49173	C12	0.38357	0.66648	0.49139
C13	0.19552	0.57348	0.49499	C13	0.19618	0.57219	0.49626
C14	0.80495	0.42747	0.49426	C14	0.80397	0.42853	0.49541
C15	0.42781	0.62324	0.49488	C15	0.42933	0.62292	0.4914
C16	0.57349	0.37911	0.49988	C16	0.57145	0.37977	0.50294
C17	0.37786	0.80524	0.49586	C17	0.37829	0.80453	0.49789
C18	0.62203	0.19591	0.49722	C18	0.62081	0.19688	0.49774
C19	0.57315	0.19593	0.49917	C19	0.57186	0.19668	0.49855
C20	0.42682	0.80536	0.49334	C20	0.42739	0.80505	0.49516
C21	0.62235	0.42783	0.4903	C21	0.61992	0.42861	0.49236
C22	0.37901	0.57414	0.50072	C22	0.3808	0.57363	0.48997
C23	0.80482	0.37851	0.49553	C23	0.80354	0.37943	0.49656
C24	0.19551	0.62237	0.497	C24	0.19623	0.62107	0.49845
C25	0.14783	0.5256	0.49495	C25	0.14818	0.52433	0.49641
C26	0.85267	0.47531	0.49497	C26	0.85215	0.47613	0.49605
C27	0.4758	0.62407	0.49451	C27	0.47752	0.62394	0.49544
C28	0.52623	0.37926	0.50925	C28	0.52392	0.37949	0.51298
C29	0.37757	0.85284	0.49953	C29	0.37765	0.85208	0.5007
C30	0.62225	0.14825	0.4968	C30	0.62118	0.14918	0.49797

C31	0.52525	0.14829	0.50104	C31	0.52406	0.1488	0.49946
C32	0.47468	0.85307	0.49394	C32	0.47507	0.85313	0.49533
C33	0.62301	0.47568	0.48717	C33	0.6197	0.47629	0.48729
C34	0.37915	0.52682	0.50839	C34	0.38143	0.52599	0.49042
C35	0.85242	0.37816	0.49677	C35	0.85098	0.37863	0.49774
C36	0.14787	0.62262	0.50029	C36	0.14859	0.62144	0.50076
C37	0.10184	0.52666	0.49789	C37	0.10208	0.52547	0.4986
C38	0.8986	0.47411	0.49664	C38	0.89805	0.47455	0.49777
C39	0.47518	0.57734	0.50265	C39	0.47687	0.57715	0.50119
C40	0.52778	0.42666	0.50925	C40	0.52518	0.42678	0.51317
C41	0.42463	0.89891	0.50026	C41	0.42449	0.89844	0.50095
C42	0.57517	0.10225	0.49844	C42	0.57422	0.10302	0.4991
C43	0.52631	0.10226	0.50081	C43	0.52525	0.10276	0.49985
C44	0.47353	0.89899	0.49734	C44	0.47359	0.89898	0.49832
C45	0.57645	0.47522	0.49736	C45	0.57292	0.475	0.49764
C46	0.42657	0.52845	0.51042	C46	0.42877	0.52815	0.49652
C47	0.89849	0.42518	0.49741	C47	0.8974	0.42537	0.4983
C48	0.10186	0.57553	0.50083	C48	0.10238	0.57447	0.50072
C49	0.48521	0.46671	0.70732	C49	0.49037	0.46594	0.71825
H1	0.14823	0.48915	0.49285	H1	0.14842	0.4878	0.49455
H2	0.85242	0.51185	0.49433	H2	0.85221	0.51282	0.49525
H3	0.51194	0.66103	0.48938	H3	0.51367	0.66102	0.4979
H4	0.48993	0.34265	0.51677	H4	0.48786	0.34285	0.52231
H5	0.3407	0.85237	0.50173	H5	0.34059	0.85123	0.5027
H6	0.65911	0.14866	0.49558	H6	0.65813	0.14976	0.49756
H7	0.48883	0.14876	0.5027	H7	0.48754	0.14908	0.50001

H8	0.51117	0.85272	0.492	H8	0.5117	0.85308	0.493
H9	0.65979	0.51177	0.47941	H9	0.65611	0.51255	0.47786
H10	0.34253	0.4903	0.51319	H10	0.3449	0.48922	0.48831
H11	0.85191	0.34124	0.49754	H11	0.84999	0.34147	0.49858
H12	0.14829	0.65949	0.50202	H12	0.14928	0.65844	0.50252
H13	0.46133	0.42719	0.68038	H13	0.45683	0.4289	0.69679
H14	0.49114	0.47342	0.7796	H14	0.52442	0.46077	0.72483
N1	0.24048	0.57276	0.49357	H15	0.48195	0.47785	0.78265
N2	0.76007	0.42828	0.4925	N1	0.24126	0.57157	0.4939
N3	0.4281	0.66876	0.49097	N2	0.75907	0.42957	0.49396
N4	0.57269	0.33325	0.50103	N3	0.42929	0.6683	0.49131
N5	0.33225	0.76021	0.49518	N4	0.57114	0.33412	0.50417
N6	0.66771	0.24085	0.49581	N5	0.33284	0.75933	0.4979
N7	0.5724	0.24086	0.49891	N6	0.6664	0.24193	0.49692
N8	0.42773	0.76054	0.49108	N7	0.57101	0.24164	0.49883
N9	0.66799	0.42824	0.48665	N8	0.42854	0.76029	0.49262
N10	0.33305	0.57317	0.49945	N9	0.66574	0.42938	0.48869
N11	0.75984	0.33285	0.49582	N10	0.3348	0.57239	0.48978
N12	0.24041	0.66803	0.49571	N11	0.75837	0.33399	0.49688
Cr1	0.5034	0.50382	0.52728	N12	0.24115	0.66674	0.49828
Cr2	0.49991	0.00059	0.50184	Cr1	0.50185	0.50356	0.53903
Cr3	0.0002	0.5003	0.50075	Cr2	0.49924	0.00077	0.50137
				Cr3	0.99998	0.49975	0.50058
Cr ₃ (HATNA) ₂	coordinates			Cr ₃ (HATNA) ₂	coordinates		

*CH ₂ OH	x	y	z	*+CH ₃ OH	x	y	z
O1	0.05492	0.56963	0.50020	O1	0.05440	0.56977	0.49998
O2	0.94583	0.43004	0.49963	O2	0.94576	0.42993	0.49900
O3	0.43163	0.48536	0.53103	O3	0.43231	0.48638	0.49911
O4	0.57171	0.51679	0.52683	O4	0.56988	0.51513	0.48658
O5	0.51571	0.9457	0.49725	O5	0.51561	0.94568	0.49998
O6	0.48415	0.05452	0.50425	O6	0.48458	0.05438	0.50019
O7	0.56955	0.0548	0.50074	O7	0.57001	0.05435	0.49908
O8	0.43021	0.94505	0.50196	O8	0.43023	0.94579	0.49998
O9	0.48777	0.43574	0.49967	O9	0.48565	0.43092	0.50434
O10	0.51319	0.56497	0.48093	O10	0.51665	0.57124	0.49771
O11	0.94602	0.51542	0.49867	O11	0.94583	0.51543	0.50026
O12	0.05464	0.48419	0.49711	O12	0.05453	0.48439	0.50003
O13	0.51595	0.54272	0.66695	O13	0.5046	0.49818	0.64546
C1	0.38303	0.71495	0.49145	C1	0.38211	0.71583	0.49872
C2	0.61758	0.28518	0.49136	C2	0.61812	0.28431	0.49937
C3	0.28511	0.66565	0.49646	C3	0.28449	0.66633	0.49929
C4	0.71558	0.33409	0.4933	C4	0.71581	0.33364	0.49985
C5	0.33416	0.61701	0.49699	C5	0.33387	0.61793	0.49703
C6	0.66675	0.38296	0.49232	C6	0.66662	0.38212	0.4948
C7	0.71592	0.38256	0.49273	C7	0.71587	0.38203	0.4981
C8	0.28491	0.61721	0.49655	C8	0.28452	0.61793	0.49873
C9	0.66598	0.28502	0.49294	C9	0.66649	0.28434	0.50003
C10	0.33459	0.71489	0.49523	C10	0.33371	0.71572	0.49935
C11	0.61789	0.33482	0.48843	C11	0.61806	0.33362	0.49739
C12	0.3829	0.66537	0.48925	C12	0.38234	0.66663	0.49684

C13	0.19578	0.57261	0.49698	C13	0.1954	0.57315	0.50038
C14	0.80499	0.42699	0.49507	C14	0.80493	0.42678	0.50095
C15	0.42691	0.61998	0.48621	C15	0.42762	0.62278	0.49388
C16	0.57424	0.38053	0.48692	C16	0.57332	0.37801	0.49516
C17	0.37879	0.80409	0.49702	C17	0.37788	0.80481	0.50067
C18	0.62148	0.19582	0.49612	C18	0.62223	0.19525	0.501
C19	0.57264	0.1959	0.49677	C19	0.57333	0.19523	0.50079
C20	0.42775	0.80429	0.4942	C20	0.42681	0.80486	0.50058
C21	0.62339	0.42873	0.4969	C21	0.6223	0.42689	0.4888
C22	0.37822	0.57193	0.50304	C22	0.37871	0.57361	0.49436
C23	0.80473	0.37799	0.49614	C23	0.80491	0.37786	0.50118
C24	0.19595	0.62158	0.49857	C24	0.19536	0.62203	0.50048
C25	0.14798	0.52479	0.49632	C25	0.14778	0.52527	0.50072
C26	0.85277	0.47481	0.49611	C26	0.8526	0.47465	0.50141
C27	0.47391	0.61927	0.47688	C27	0.47563	0.6237	0.49367
C28	0.52686	0.38142	0.48347	C28	0.5257	0.37769	0.49949
C29	0.37822	0.85162	0.49962	C29	0.37767	0.85249	0.50087
C30	0.62178	0.14812	0.49753	C30	0.62248	0.14759	0.50077
C31	0.52482	0.14805	0.50027	C31	0.52543	0.14762	0.50099
C32	0.47546	0.85226	0.49427	C32	0.47469	0.85244	0.50086
C33	0.62457	0.47661	0.50852	C33	0.62271	0.47457	0.48345
C34	0.37798	0.52487	0.51773	C34	0.37878	0.5261	0.49469
C35	0.85243	0.37765	0.49816	C35	0.85252	0.37755	0.50085
C36	0.14832	0.62196	0.50016	C36	0.1477	0.62229	0.50076
C37	0.10203	0.52601	0.4974	C37	0.10177	0.52633	0.50031
C38	0.89869	0.47358	0.49769	C38	0.89854	0.47349	0.50061

C39	0.47301	0.57247	0.48882	C39	0.47497	0.57678	0.49499
C40	0.52898	0.42852	0.49577	C40	0.5269	0.42485	0.49716
C41	0.4251	0.89785	0.49956	C41	0.4248	0.89846	0.50038
C42	0.5748	0.10206	0.50003	C42	0.57539	0.10165	0.49996
C43	0.5259	0.10195	0.50181	C43	0.52652	0.10164	0.5004
C44	0.47411	0.8982	0.49685	C44	0.47364	0.89844	0.50039
C45	0.5777	0.47592	0.51041	C45	0.57563	0.47353	0.4876
C46	0.42496	0.52545	0.51376	C46	0.42617	0.52772	0.49559
C47	0.89852	0.42466	0.49852	C47	0.89851	0.42461	0.50003
C48	0.1022	0.57495	0.49935	C48	0.10173	0.57518	0.5003
C49	0.49552	0.48767	0.66792	C49	0.48751	0.52497	0.70674
H1	0.14821	0.48825	0.4953	H1	0.14818	0.48881	0.50122
H2	0.85246	0.51132	0.49579	H2	0.85224	0.51114	0.50183
H3	0.50981	0.65515	0.46216	H3	0.51184	0.66076	0.49355
H4	0.4902	0.34526	0.47486	H4	0.48941	0.34095	0.50563
H5	0.34117	0.85082	0.50183	H5	0.34084	0.85217	0.50103
H6	0.65872	0.1487	0.49679	H6	0.65933	0.14797	0.50084
H7	0.48829	0.14834	0.50109	H7	0.48899	0.14803	0.50152
H8	0.51208	0.8522	0.49218	H8	0.5111	0.85195	0.50127
H9	0.66157	0.51225	0.51811	H9	0.65948	0.5109	0.47854
H10	0.34165	0.48948	0.5327	H10	0.34215	0.48945	0.49559
H11	0.85195	0.34075	0.49917	H11	0.8521	0.34068	0.50095
H12	0.14893	0.65891	0.50171	H12	0.14806	0.65913	0.50088
H13	0.45611	0.46473	0.69419	H13	0.51605	0.54171	0.76083
H14	0.52431	0.47898	0.69593	H14	0.49233	0.4626	0.66514
H15	0.4875	0.55017	0.67223	H15	0.44856	0.49783	0.73216

N1	0.24063	0.57169	0.49637	H16	0.48646	0.5559	0.66892
N2	0.76022	0.42802	0.49338	N1	0.24034	0.57238	0.49959
N3	0.42779	0.66596	0.48162	N2	0.76006	0.4276	0.4995
N4	0.57287	0.33441	0.48377	N3	0.42791	0.66839	0.49491
N5	0.33321	0.75907	0.49763	N4	0.57268	0.33224	0.49803
N6	0.66715	0.24071	0.49461	N5	0.33222	0.75985	0.50031
N7	0.57198	0.24094	0.49387	N6	0.66792	0.24016	0.5009
N8	0.42854	0.75931	0.49131	N7	0.57255	0.24016	0.50007
N9	0.66875	0.42861	0.49727	N8	0.42764	0.76	0.49972
N10	0.33269	0.57179	0.50557	N9	0.66805	0.42748	0.48933
N11	0.75967	0.33243	0.49514	N10	0.33278	0.57266	0.49565
N12	0.24099	0.66718	0.49805	N11	0.75995	0.33218	0.50122
Cr1	0.50265	0.50171	0.53705	N12	0.24029	0.6677	0.50012
Cr2	0.49987	0.00003	0.50201	Cr1	0.50197	0.50161	0.51123
Cr3	0.00033	0.49982	0.49922	Cr2	0.50014	0.00006	0.49979
				Cr3	0.00014	0.49985	0.4998

Cr₃(HATNA)₂

coordinates

*O	x	y	z
O1	0.05531	0.57002	0.50006
O2	0.94464	0.42993	0.50003
O3	0.43210	0.48350	0.49848
O4	0.56797	0.51659	0.49889
O5	0.51552	0.94556	0.49987
O6	0.48450	0.05446	0.49986

Cr₃(HATNA)₂

coordinates

*OH	x	y	z
O1	0.05496	0.56983	0.50057
O2	0.94494	0.43024	0.50046
O3	0.43517	0.48552	0.49814
O4	0.56638	0.51568	0.49433
O5	0.51541	0.94557	0.50025
O6	0.48438	0.05456	0.4999

O7	0.57006	0.05536	0.50001	O7	0.56971	0.05485	0.50055
O8	0.42997	0.94469	0.50007	O8	0.43008	0.94524	0.50111
O9	0.48345	0.43207	0.49897	O9	0.48414	0.43156	0.51774
O10	0.51654	0.56796	0.49842	O10	0.51751	0.57025	0.51397
O11	0.94553	0.5155	0.49986	O11	0.94547	0.51568	0.49986
O12	0.05443	0.48447	0.49987	O12	0.05441	0.48441	0.50015
O13	0.49991	0.50017	0.64064	O13	0.5026	0.50227	0.65264
C1	0.38336	0.71473	0.50094	C1	0.38297	0.71505	0.4969
C2	0.61662	0.28529	0.50087	C2	0.61693	0.28509	0.4972
C3	0.28541	0.66519	0.50098	C3	0.2853	0.66526	0.49833
C4	0.71456	0.33483	0.50092	C4	0.71465	0.33471	0.49828
C5	0.33461	0.61652	0.49996	C5	0.33484	0.61686	0.49411
C6	0.66537	0.3835	0.49998	C6	0.6653	0.38332	0.49384
C7	0.71471	0.38338	0.50087	C7	0.71473	0.38322	0.49655
C8	0.28527	0.61663	0.50095	C8	0.28528	0.61674	0.49659
C9	0.66517	0.28544	0.50092	C9	0.6654	0.2853	0.49852
C10	0.3348	0.71458	0.50098	C10	0.33447	0.71478	0.49835
C11	0.61649	0.33463	0.49998	C11	0.61677	0.33456	0.49561
C12	0.38348	0.66539	0.49995	C12	0.38317	0.66566	0.49483
C13	0.19592	0.57233	0.50038	C13	0.1959	0.57236	0.49946
C14	0.80405	0.42769	0.50034	C14	0.80406	0.42765	0.49973
C15	0.42842	0.62087	0.49549	C15	0.42869	0.62183	0.49401
C16	0.57156	0.37917	0.49587	C16	0.57171	0.37884	0.49539
C17	0.37861	0.80378	0.50008	C17	0.37827	0.80403	0.50051
C18	0.62137	0.19625	0.50007	C18	0.62152	0.19607	0.5005
C19	0.57231	0.19595	0.50033	C19	0.57254	0.19582	0.49959

C20	0.42767	0.80407	0.50037	C20	0.42727	0.80429	0.49962
C21	0.62084	0.42845	0.49585	C21	0.62042	0.42785	0.49061
C22	0.37915	0.5716	0.49553	C22	0.38011	0.57262	0.49167
C23	0.80375	0.37862	0.50008	C23	0.80388	0.37866	0.50053
C24	0.19621	0.62138	0.50009	C24	0.19604	0.62131	0.5004
C25	0.14787	0.52462	0.50009	C25	0.1479	0.52467	0.50005
C26	0.8521	0.47538	0.50007	C26	0.852	0.47535	0.50032
C27	0.4762	0.62117	0.49509	C27	0.47683	0.62275	0.49777
C28	0.52379	0.37887	0.49561	C28	0.52392	0.37832	0.50111
C29	0.3779	0.85116	0.49977	C29	0.37779	0.85171	0.50159
C30	0.6221	0.14888	0.49978	C30	0.62204	0.14842	0.50126
C31	0.52461	0.1479	0.50006	C31	0.52481	0.14795	0.50001
C32	0.47538	0.85212	0.50008	C32	0.475	0.85218	0.5
C33	0.62115	0.47623	0.49554	C33	0.62033	0.47571	0.48753
C34	0.37886	0.52382	0.49518	C34	0.38069	0.52489	0.49041
C35	0.85111	0.3779	0.49979	C35	0.85144	0.37808	0.50133
C36	0.14883	0.62209	0.49977	C36	0.14847	0.62192	0.50139
C37	0.10199	0.52603	0.49984	C37	0.10193	0.526	0.50041
C38	0.89797	0.47395	0.49984	C38	0.89797	0.47405	0.50041
C39	0.47514	0.57397	0.49591	C39	0.47611	0.57579	0.50215
C40	0.52486	0.42609	0.49645	C40	0.52511	0.42556	0.50394
C41	0.42487	0.89762	0.49982	C41	0.42475	0.89792	0.50114
C42	0.57515	0.10242	0.49982	C42	0.57508	0.1022	0.50079
C43	0.52605	0.10203	0.49983	C43	0.5261	0.10197	0.50027
C44	0.47396	0.898	0.49983	C44	0.47371	0.89812	0.50053
C45	0.57395	0.47517	0.49641	C45	0.57324	0.4742	0.4937

C46	0.42607	0.5249	0.49595	C46	0.428	0.52685	0.49579
C47	0.89758	0.42485	0.49983	C47	0.8977	0.42503	0.50083
C48	0.10237	0.57512	0.49983	C48	0.10218	0.57502	0.50081
H1	0.14792	0.48798	0.50004	H1	0.14787	0.488	0.4999
H2	0.85207	0.51203	0.50003	H2	0.852	0.51202	0.50003
H3	0.51267	0.658	0.49619	H3	0.51301	0.65975	0.5013
H4	0.48732	0.34204	0.49681	H4	0.48771	0.34144	0.50653
H5	0.34084	0.85037	0.49991	H5	0.34078	0.85103	0.50234
H6	0.65918	0.1497	0.49991	H6	0.65911	0.1492	0.50176
H7	0.48796	0.14793	0.50003	H7	0.48818	0.14802	0.49972
H8	0.51202	0.85207	0.50003	H8	0.51155	0.85198	0.49959
H9	0.65799	0.5127	0.4967	H9	0.65703	0.51218	0.48334
H10	0.34204	0.48735	0.49633	H10	0.34412	0.48818	0.48814
H11	0.8503	0.34082	0.49992	H11	0.8506	0.34099	0.50184
H12	0.14963	0.65915	0.49991	H12	0.14929	0.65899	0.50214
N1	0.24069	0.57121	0.5008	H13	0.4969	0.46979	0.67944
N2	0.75929	0.42881	0.50071	N1	0.24077	0.57132	0.49756
N3	0.42887	0.66657	0.49762	N2	0.75918	0.42861	0.49764
N4	0.57111	0.33347	0.49789	N3	0.42877	0.66732	0.49471
N5	0.33311	0.75855	0.5004	N4	0.57133	0.33312	0.49672
N6	0.66688	0.24148	0.50038	N5	0.3328	0.75891	0.50018
N7	0.57119	0.24071	0.50071	N6	0.66702	0.24118	0.50009
N8	0.42878	0.75931	0.50078	N7	0.57156	0.2407	0.49808
N9	0.66654	0.42889	0.49786	N8	0.42837	0.75948	0.4978
N10	0.33345	0.57113	0.49768	N9	0.66631	0.42868	0.49048
N11	0.75852	0.33312	0.50039	N10	0.33416	0.57155	0.49171

N12	0.24144	0.66689	0.50041	N11	0.75879	0.33316	0.50026
Cr1	0.50000	0.50007	0.53454	N12	0.24114	0.66676	0.5002
Cr2	0.50002	0.00002	0.50010	Cr1	0.50130	0.50132	0.53457
Cr3	- 0.00002	0.49997	0.50010	Cr2	0.49988	0.00001	0.50006
				Cr3	- 0.00006	0.50000	0.49979
Cr ₃ (HATNA) ₂				Cr ₃ (HATNA) ₂			
	coordinates				coordinates		
*+H ₂ O	x	y	z	*H	x	y	z
O1	0.05431	0.56986	0.50000	O1	0.05450	0.56984	0.50014
O2	0.94568	0.43014	0.50000	O2	0.94550	0.43015	0.50018
O3	0.43066	0.4846	0.49030	O3	0.43127	0.48453	0.49859
O4	0.56949	0.51537	0.48882	O4	0.56901	0.51567	0.49844
O5	0.51554	0.94574	0.50000	O5	0.51552	0.94561	0.49991
O6	0.48446	0.05427	0.50000	O6	0.48445	0.05435	0.49993
O7	0.56986	0.05431	0.50000	O7	0.56982	0.05448	0.50017
O8	0.43015	0.94569	0.50000	O8	0.43014	0.94548	0.50015
O9	0.48458	0.43063	0.48975	O9	0.48454	0.43128	0.49862
O10	0.51536	0.56946	0.48951	O10	0.51569	0.56903	0.49844
O11	0.94573	0.51554	0.50000	O11	0.94561	0.51553	0.4999
O12	0.05427	0.48446	0.50000	O12	0.05437	0.48445	0.49994
O13	0.50574	0.50245	0.67994	C1	0.38234	0.7154	0.5009
C1	0.38205	0.71568	0.49997	C2	0.61765	0.28458	0.50092
C2	0.61795	0.28433	0.49996	C3	0.28461	0.66606	0.50068
C3	0.28436	0.66639	0.49998	C4	0.71537	0.33389	0.50070
C4	0.71564	0.3336	0.49998	C5	0.33393	0.61761	0.50026

C5	0.33363	0.61801	0.49999	C6	0.66608	0.38236	0.50021
C6	0.66637	0.38201	0.49998	C7	0.7154	0.38232	0.50092
C7	0.71568	0.38205	0.49997	C8	0.2846	0.61764	0.5009
C8	0.28433	0.61795	0.49997	C9	0.66607	0.2846	0.5007
C9	0.66639	0.28436	0.49998	C10	0.3339	0.71536	0.50068
C10	0.33361	0.71564	0.49998	C11	0.61762	0.33392	0.50025
C11	0.618	0.33363	0.49999	C12	0.38238	0.66607	0.50023
C12	0.382	0.66637	0.49999	C13	0.1954	0.57294	0.50035
C13	0.19523	0.57314	0.50001	C14	0.80459	0.42701	0.5004
C14	0.80477	0.42686	0.50001	C15	0.42725	0.62177	0.49726
C15	0.42694	0.62204	0.50082	C16	0.57284	0.37831	0.49735
C16	0.57306	0.37799	0.50086	C17	0.37806	0.80449	0.50003
C17	0.37791	0.80475	0.50001	C18	0.62191	0.19546	0.49998
C18	0.62209	0.19525	0.50001	C19	0.57295	0.19539	0.50035
C19	0.57314	0.19522	0.50001	C20	0.42701	0.80458	0.50038
C20	0.42686	0.80477	0.50001	C21	0.62177	0.42721	0.49716
C21	0.62202	0.42696	0.50087	C22	0.37832	0.57281	0.49746
C22	0.37797	0.57308	0.50081	C23	0.80452	0.37805	0.50002
C23	0.80475	0.37791	0.50001	C24	0.19548	0.6219	0.50000
C24	0.19526	0.62209	0.50001	C25	0.14763	0.52507	0.50007
C25	0.14752	0.52521	0.50000	C26	0.85233	0.47488	0.50009
C26	0.85248	0.47479	0.50000	C27	0.47522	0.62206	0.49568
C27	0.47498	0.62211	0.50120	C28	0.52491	0.37814	0.49590
C28	0.52501	0.37795	0.50113	C29	0.3777	0.85213	0.49977
C29	0.37767	0.85244	0.50000	C30	0.62227	0.14782	0.49974
C30	0.62233	0.14755	0.50000	C31	0.52508	0.14762	0.50007

C31	0.52521	0.14752	0.50000	C32	0.47489	0.85232	0.50009
C32	0.47479	0.85248	0.50000	C33	0.62206	0.47521	0.49557
C33	0.62208	0.47499	0.50116	C34	0.37815	0.52489	0.49602
C34	0.37792	0.52501	0.50117	C35	0.85216	0.37777	0.49975
C35	0.85244	0.37766	0.50000	C36	0.14785	0.62227	0.49976
C36	0.14756	0.62233	0.50000	C37	0.10171	0.52629	0.49987
C37	0.10158	0.52636	0.50000	C38	0.89828	0.47369	0.49987
C38	0.89842	0.47364	0.50000	C39	0.47402	0.57496	0.49638
C39	0.47376	0.57508	0.49812	C40	0.52621	0.42528	0.4965
C40	0.52619	0.42491	0.49789	C41	0.42476	0.89819	0.49991
C41	0.42477	0.89842	0.50000	C42	0.57521	0.10176	0.49987
C42	0.57523	0.10158	0.50000	C43	0.52629	0.10169	0.49986
C43	0.52637	0.10158	0.50000	C44	0.47369	0.89826	0.49988
C44	0.47364	0.89842	0.50000	C45	0.57497	0.474	0.49634
C45	0.57507	0.47379	0.49777	C46	0.42531	0.5262	0.49654
C46	0.4249	0.52621	0.49822	C47	0.89821	0.42476	0.49989
C47	0.89842	0.42477	0.50000	C48	0.10179	0.57522	0.49988
C48	0.10158	0.57523	0.50000	H1	0.14794	0.48856	0.50001
H1	0.14783	0.4887	0.50000	H2	0.85203	0.51139	0.50001
H2	0.85217	0.51129	0.50000	H3	0.51168	0.6589	0.49558
H3	0.51125	0.65915	0.49994	H4	0.48841	0.34131	0.49613
H4	0.48876	0.34086	0.4999	H5	0.34078	0.85163	0.49993
H5	0.34086	0.85215	0.50000	H6	0.65917	0.14831	0.49991
H6	0.65914	0.14785	0.50000	H7	0.48857	0.14794	0.50000
H7	0.48871	0.14783	0.50000	H8	0.51139	0.85202	0.50001
H8	0.51129	0.85217	0.50000	H9	0.65892	0.51166	0.49539

H9	0.65914	0.51124	0.49994	H10	0.34132	0.4884	0.49626
H10	0.34084	0.48875	0.49990	H11	0.85167	0.34080	0.49992
H11	0.85215	0.34085	0.50000	H12	0.14835	0.65918	0.49992
H12	0.14785	0.65915	0.50000	H13	0.50002	0.50011	0.61464
H13	0.48269	0.51039	0.64540	N1	0.24030	0.57211	0.50088
H14	0.51213	0.48039	0.63977	N2	0.75970	0.42784	0.50095
N1	0.24008	0.57236	0.50000	N3	0.42795	0.66745	0.49882
N2	0.75992	0.42763	0.50000	N4	0.5721	0.33261	0.49897
N3	0.42774	0.6676	0.49992	N5	0.33243	0.75951	0.50022
N4	0.57225	0.33243	0.49996	N6	0.66752	0.24044	0.50019
N5	0.33224	0.75985	0.50000	N7	0.57212	0.24028	0.50090
N6	0.66776	0.24015	0.50001	N8	0.42786	0.75969	0.50091
N7	0.57236	0.24008	0.49999	N9	0.66746	0.42793	0.49873
N8	0.42763	0.75992	0.50000	N10	0.33262	0.57208	0.49905
N9	0.66758	0.42775	0.49994	N11	0.75954	0.33242	0.50022
N10	0.33241	0.57225	0.49994	N12	0.24046	0.66752	0.50019
N11	0.75984	0.33224	0.50000	Cr1	0.5002	0.50018	0.50987
N12	0.24016	0.66776	0.50000	Cr2	0.49996	- 0.00003	0.50023
Cr1	0.50012	0.50023	0.47681	Cr3	0.00000	0.49999	0.50023
Cr2	0.50000	0.00000	0.50000				
Cr3	0.00000	0.50000	0.50000				

Ru₃(HATNA)₂

coordinates

Ru₃(HATNA)₂

coordinates

*OCHO

x

y

z

*COOH

x

y

z

O1

0.05763

0.57063

0.49976

O1

0.05763

0.57070

0.49996

O2	0.94200	0.42954	0.49948	O2	0.94245	0.42924	0.50002
O3	0.43178	0.48837	0.51365	O3	0.42952	0.48764	0.49534
O4	0.57357	0.51606	0.49328	O4	0.57234	0.5138	0.48756
O5	0.5132	0.94206	0.50022	O5	0.51298	0.94243	0.49981
O6	0.48696	0.05725	0.50009	O6	0.48695	0.05766	0.49984
O7	0.57068	0.05765	0.49976	O7	0.57068	0.05761	0.49993
O8	0.4296	0.94203	0.4997	O8	0.42922	0.94243	0.50001
O9	0.48839	0.43174	0.51657	O9	0.48779	0.42961	0.49369
O10	0.51606	0.57364	0.49249	O10	0.51375	0.57223	0.48844
O11	0.94206	0.51315	0.50003	O11	0.94244	0.51299	0.49982
O12	0.05726	0.48692	0.49999	O12	0.05766	0.48696	0.49984
O13	0.48586	0.48192	0.78588	O13	0.52823	0.52962	0.68012
O14	0.50982	0.51099	0.64726	O14	0.45474	0.45248	0.66315
C1	0.38166	0.71487	0.49856	C1	0.38158	0.7154	0.50174
C2	0.61762	0.28475	0.49938	C2	0.61844	0.28471	0.50138
C3	0.28479	0.66581	0.49988	C3	0.28469	0.66645	0.50117
C4	0.71478	0.33361	0.49977	C4	0.71541	0.33352	0.5013
C5	0.33382	0.61773	0.49884	C5	0.33362	0.61846	0.50045
C6	0.66597	0.38172	0.49596	C6	0.66667	0.38164	0.50111
C7	0.71482	0.38166	0.49822	C7	0.71543	0.38155	0.50179
C8	0.28477	0.61766	0.49946	C8	0.28473	0.61843	0.50129
C9	0.66579	0.2848	0.49986	C9	0.66647	0.28468	0.50119
C10	0.33361	0.71483	0.49983	C10	0.33355	0.71538	0.50128
C11	0.61769	0.33379	0.49867	C11	0.61849	0.3336	0.50056
C12	0.38174	0.66603	0.49649	C12	0.38167	0.66664	0.50099
C13	0.19649	0.57355	0.50003	C13	0.19659	0.5741	0.50065

C14	0.80297	0.42596	0.5003	C14	0.80353	0.42583	0.50078
C15	0.42666	0.62281	0.49377	C15	0.42617	0.62305	0.49668
C16	0.57408	0.37848	0.4998	C16	0.5745	0.37773	0.49607
C17	0.37747	0.803	0.50063	C17	0.37734	0.80352	0.50034
C18	0.62211	0.1966	0.50036	C18	0.62257	0.19654	0.50033
C19	0.57355	0.19647	0.50002	C19	0.5741	0.19658	0.50065
C20	0.42596	0.80301	0.50034	C20	0.42584	0.80351	0.50077
C21	0.62269	0.42659	0.49319	C21	0.62314	0.42619	0.49665
C22	0.37855	0.57416	0.49961	C22	0.3777	0.5744	0.49633
C23	0.80296	0.37746	0.50071	C23	0.80355	0.37734	0.50033
C24	0.1966	0.62209	0.50032	C24	0.19655	0.62257	0.50033
C25	0.14959	0.5264	0.49998	C25	0.14985	0.52686	0.50019
C26	0.84971	0.47326	0.50057	C26	0.85024	0.47309	0.50017
C27	0.47415	0.62388	0.48959	C27	0.47342	0.62385	0.49353
C28	0.52749	0.37907	0.50583	C28	0.5275	0.37738	0.49323
C29	0.37708	0.84978	0.50047	C29	0.37685	0.85024	0.49993
C30	0.62281	0.14998	0.50031	C30	0.62305	0.14981	0.49988
C31	0.52642	0.14957	0.49999	C31	0.52686	0.14985	0.50019
C32	0.47327	0.84973	0.5006	C32	0.47309	0.85024	0.50017
C33	0.62371	0.47405	0.48892	C33	0.62397	0.47346	0.4934
C34	0.37912	0.52754	0.50463	C34	0.37732	0.52738	0.49408
C35	0.84973	0.37707	0.50053	C35	0.85027	0.37686	0.49992
C36	0.14996	0.62278	0.50026	C36	0.14983	0.62306	0.49988
C37	0.10419	0.52782	0.49996	C37	0.10442	0.52809	0.49991
C38	0.89522	0.47211	0.50022	C38	0.89567	0.47188	0.49989
C39	0.47401	0.57775	0.49534	C39	0.4725	0.57726	0.49165

C40	0.52934	0.42623	0.50627	C40	0.52879	0.42425	0.49221
C41	0.42381	0.89522	0.50007	C41	0.42355	0.89568	0.49992
C42	0.57625	0.1044	0.49994	C42	0.57637	0.10439	0.49991
C43	0.52785	0.10419	0.49999	C43	0.52808	0.10442	0.49991
C44	0.47214	0.89524	0.50031	C44	0.47187	0.89566	0.49987
C45	0.5776	0.47391	0.49552	C45	0.5774	0.47256	0.49101
C46	0.42627	0.52938	0.50493	C46	0.42419	0.52864	0.49332
C47	0.8952	0.42378	0.49997	C47	0.89569	0.42356	0.49991
C48	0.10439	0.57621	0.49994	C48	0.1044	0.57639	0.4999
C49	0.47886	0.47443	0.70633	C49	0.49612	0.49585	0.63364
H1	0.14977	0.49026	0.49996	H1	0.15023	0.49083	0.50024
H2	0.84921	0.50925	0.50061	H2	0.84981	0.5091	0.5002
H3	0.50975	0.66054	0.48439	H3	0.50944	0.6603	0.49344
H4	0.49115	0.34318	0.5118	H4	0.49145	0.34097	0.49287
H5	0.34071	0.84948	0.50057	H5	0.34042	0.84984	0.49961
H6	0.65931	0.15052	0.50058	H6	0.65949	0.15022	0.49957
H7	0.49026	0.14974	0.49997	H7	0.49083	0.15024	0.50024
H8	0.50925	0.8492	0.50067	H8	0.5091	0.84981	0.50021
H9	0.66032	0.50967	0.48319	H9	0.66047	0.50942	0.49375
H10	0.34322	0.49117	0.50984	H10	0.34088	0.49135	0.4937
H11	0.84942	0.34067	0.50069	H11	0.84987	0.34043	0.4996
H12	0.1505	0.65928	0.50049	H12	0.15024	0.65949	0.49956
H13	0.448	0.43878	0.67551	H13	0.45593	0.45359	0.72868
N1	0.24119	0.57287	0.49963	N1	0.24127	0.57353	0.50118
N2	0.75828	0.42655	0.49913	N2	0.75889	0.42644	0.50159
N3	0.42673	0.66781	0.49292	N3	0.42658	0.66821	0.49939

N4	0.57306	0.33291	0.50102	N4	0.57376	0.33234	0.49824
N5	0.33217	0.75828	0.50082	N5	0.33208	0.75881	0.50056
N6	0.66728	0.24138	0.50047	N6	0.66785	0.24121	0.5006
N7	0.57285	0.24117	0.49958	N7	0.57354	0.24126	0.50121
N8	0.42653	0.75831	0.49938	N8	0.42646	0.75888	0.50157
N9	0.66771	0.42668	0.49204	N9	0.66828	0.42656	0.49962
N10	0.33295	0.57313	0.50083	N10	0.33233	0.57371	0.49816
N11	0.75823	0.33217	0.50098	N11	0.75884	0.33207	0.50055
N12	0.24137	0.66729	0.5004	N12	0.24123	0.66785	0.50061
Ru1	0.50417	0.50425	0.51896	Ru1	0.5015	0.50143	0.49839
Ru2	0.50019	- 0.00025	0.49992	Ru2	0.49996	0.00004	0.50001
Ru3	- 0.00026	0.50012	0.49976	Ru3	0.00005	0.49998	0.50002

Ru ₃ (HATNA) ₂				coordinates	Ru ₃ (HATNA) ₂				coordinates
*CO	x	y	z		*HCOOH	x	y	z	
O1	0.0574	0.56987	0.50051		O1	0.05754	0.57034	0.49974	
O2	0.94215	0.42865	0.49843		O2	0.94227	0.42897	0.49828	
O3	0.42784	0.48719	0.51354		O3	0.42724	0.48567	0.47928	
O4	0.57269	0.51506	0.48811		O4	0.56859	0.51134	0.5157	
O5	0.51228	0.94287	0.49937		O5	0.51289	0.94243	0.49873	
O6	0.48613	0.05803	0.49996		O6	0.48667	0.05766	0.49801	
O7	0.56969	0.05783	0.5001		O7	0.57037	0.05752	0.49934	
O8	0.42843	0.94248	0.49957		O8	0.42902	0.94228	0.49815	
O9	0.48694	0.42945	0.48543		O9	0.48555	0.42712	0.48032	
O10	0.51418	0.57382	0.51554		O10	0.51154	0.56876	0.51444	

O11	0.94258	0.51255	0.4984	O11	0.94246	0.51287	0.49904
O12	0.05767	0.48633	0.50123	O12	0.05766	0.48664	0.49808
O13	0.51043	0.48818	0.70932	O13	0.4842	0.48558	0.66369
C1	0.38154	0.71563	0.49579	O14	0.55739	0.56028	0.69806
C2	0.61819	0.2852	0.49943	C1	0.38172	0.71521	0.5008
C3	0.28454	0.66643	0.49753	C2	0.61842	0.28471	0.49595
C4	0.71516	0.33381	0.49997	C3	0.2847	0.66641	0.49871
C5	0.33358	0.61853	0.49266	C4	0.71522	0.33366	0.49911
C6	0.66658	0.38233	0.49864	C5	0.33358	0.61845	0.49491
C7	0.71534	0.382	0.49961	C6	0.66629	0.38165	0.50097
C8	0.2847	0.61846	0.49563	C7	0.71522	0.38174	0.50048
C9	0.66616	0.28499	0.50004	C8	0.28472	0.61842	0.49637
C10	0.33339	0.71545	0.49754	C9	0.6664	0.2847	0.4982
C11	0.61829	0.33418	0.49809	C10	0.33364	0.71523	0.49954
C12	0.38177	0.66688	0.49319	C11	0.61844	0.33355	0.49469
C13	0.19656	0.57394	0.49891	C12	0.38165	0.66631	0.50121
C14	0.80352	0.42593	0.49954	C13	0.19661	0.57402	0.49776
C15	0.42628	0.62322	0.49167	C14	0.80341	0.42598	0.5
C16	0.5743	0.37841	0.49445	C15	0.42537	0.62184	0.50371
C17	0.37709	0.80362	0.49932	C16	0.57394	0.37712	0.49094
C18	0.62205	0.19684	0.50012	C17	0.37746	0.80335	0.49954
C19	0.57366	0.197	0.49993	C18	0.62249	0.19653	0.49897
C20	0.42567	0.8038	0.49859	C19	0.57404	0.19661	0.49746
C21	0.62295	0.42694	0.49558	C20	0.42596	0.80339	0.50005
C22	0.37769	0.5745	0.49064	C21	0.62178	0.42531	0.50395
C23	0.8033	0.37734	0.49965	C22	0.37719	0.57402	0.49054

C24	0.19639	0.62234	0.49938	C23	0.80336	0.37746	0.49941
C25	0.14995	0.52655	0.49986	C24	0.19655	0.62246	0.49924
C26	0.85037	0.47308	0.49925	C25	0.14992	0.52673	0.4978
C27	0.4733	0.62393	0.49589	C26	0.85025	0.47314	0.49975
C28	0.52739	0.37807	0.49159	C27	0.47194	0.6213	0.51223
C29	0.37636	0.85023	0.49989	C28	0.527	0.37666	0.4817
C30	0.62233	0.15001	0.50022	C29	0.37686	0.85004	0.49908
C31	0.5263	0.15034	0.49997	C30	0.62284	0.14973	0.49996
C32	0.47281	0.85065	0.49899	C31	0.52675	0.1499	0.49756
C33	0.62368	0.4741	0.49422	C32	0.47314	0.85021	0.49963
C34	0.37735	0.52765	0.49348	C33	0.6212	0.47184	0.51281
C35	0.84992	0.37662	0.49925	C34	0.3768	0.52713	0.48092
C36	0.14956	0.62259	0.50002	C35	0.85003	0.37684	0.49904
C37	0.1044	0.52753	0.50065	C36	0.14974	0.62282	0.50012
C38	0.89568	0.47159	0.49875	C37	0.10441	0.52782	0.49846
C39	0.4727	0.57735	0.50198	C38	0.89564	0.4718	0.49924
C40	0.52832	0.42484	0.49144	C39	0.47065	0.57467	0.50565
C41	0.42294	0.8958	0.4996	C40	0.52724	0.42275	0.48856
C42	0.57555	0.10465	0.5002	C41	0.42347	0.89556	0.49878
C43	0.52731	0.10479	0.5001	C42	0.5761	0.10433	0.4993
C44	0.47134	0.89598	0.49928	C43	0.52784	0.10441	0.49831
C45	0.57707	0.4735	0.49296	C44	0.47183	0.89561	0.49906
C46	0.42406	0.52859	0.5008	C45	0.57454	0.47051	0.50654
C47	0.89547	0.42318	0.49878	C46	0.4229	0.52738	0.48766
C48	0.10423	0.57576	0.5004	C47	0.89555	0.42343	0.49888
C49	0.50604	0.49387	0.63357	C48	0.10435	0.5761	0.49956

H1	0.15058	0.49062	0.49942	C49	0.51451	0.51702	0.71746
H2	0.85019	0.50925	0.49937	H1	0.15042	0.49076	0.49689
H3	0.50922	0.66046	0.49717	H2	0.85002	0.50926	0.49997
H4	0.49128	0.34172	0.49095	H3	0.50771	0.65717	0.52335
H5	0.33985	0.84965	0.50024	H4	0.49153	0.3405	0.47075
H6	0.65865	0.15021	0.50022	H5	0.34037	0.84955	0.4989
H7	0.49036	0.15093	0.49978	H6	0.65923	0.15004	0.50094
H8	0.50893	0.85042	0.49866	H7	0.49079	0.15044	0.49664
H9	0.66014	0.51009	0.49545	H8	0.50924	0.84993	0.49981
H10	0.341	0.49153	0.49303	H9	0.65707	0.50763	0.52388
H11	0.8493	0.3401	0.49955	H10	0.34066	0.49167	0.46972
H12	0.14974	0.6589	0.50005	H11	0.84951	0.34034	0.4988
N1	0.2413	0.57353	0.49689	H12	0.1501	0.65923	0.50124
N2	0.75895	0.42673	0.49963	H13	0.50848	0.5118	0.79016
N3	0.42662	0.66849	0.49155	H14	0.56159	0.56411	0.63271
N4	0.57359	0.33295	0.4963	N1	0.24131	0.57349	0.49631
N5	0.33184	0.75881	0.49926	N2	0.75873	0.42661	0.50072
N6	0.66743	0.24147	0.50032	N3	0.42626	0.66724	0.5071
N7	0.57325	0.24177	0.49949	N4	0.57365	0.33205	0.48822
N8	0.42634	0.7592	0.49695	N5	0.33221	0.75866	0.49931
N9	0.66816	0.42721	0.49798	N6	0.66779	0.24122	0.49939
N10	0.33226	0.57383	0.4899	N7	0.57349	0.24128	0.49582
N11	0.75848	0.33216	0.5	N8	0.42659	0.75873	0.50085
N12	0.24104	0.66771	0.49914	N9	0.6672	0.42625	0.50704
Ru1	0.50085	0.50082	0.51421	N10	0.33209	0.57368	0.48809
Ru2	0.49902	0.00031	0.49969	N11	0.75865	0.33222	0.49895

Ru3	- 0.00008	0.49919	0.4996	N12	0.24121	0.66779	0.49978
				Ru1	0.49674	0.49675	0.50135
				Ru2	0.49969	- 0.00002	0.49831
				Ru3	- 0.00001	0.49967	0.49857
Ru ₃ (HATNA) ₂ coordinates				Ru ₃ (HATNA) ₂ coordinates			
*CHO	x	y	z	*COH	x	y	z
O1	0.05737	0.57029	0.49846	O1	0.05802	0.57016	0.49904
O2	0.94246	0.42899	0.4986	O2	0.94227	0.42895	0.49845
O3	0.42874	0.48784	0.48579	O3	0.42731	0.48506	0.49835
O4	0.57163	0.51305	0.49029	O4	0.57327	0.51567	0.49678
O5	0.51286	0.94269	0.49848	O5	0.51302	0.94277	0.49906
O6	0.48693	0.05783	0.49916	O6	0.48634	0.05785	0.49916
O7	0.57056	0.05772	0.49908	O7	0.57019	0.0581	0.49915
O8	0.42923	0.94275	0.49829	O8	0.429	0.94215	0.4983
O9	0.48768	0.42909	0.4952	O9	0.48585	0.4289	0.49121
O10	0.5129	0.57206	0.48195	O10	0.51476	0.57194	0.49148
O11	0.94255	0.51271	0.49909	O11	0.94279	0.51291	0.49949
O12	0.05767	0.48675	0.49856	O12	0.0579	0.48636	0.4989
O13	0.51335	0.48269	0.67979	O13	0.50324	0.50238	0.72223
C1	0.38143	0.7158	0.50164	C1	0.38229	0.71514	0.49913
C2	0.61854	0.28478	0.49967	C2	0.61805	0.28532	0.49878
C3	0.28445	0.66676	0.50198	C3	0.28517	0.66613	0.50107
C4	0.71547	0.33356	0.5	C4	0.71514	0.33403	0.50074
C5	0.33342	0.61892	0.49865	C5	0.33409	0.61817	0.49561

C6	0.66678	0.38176	0.49997	C6	0.66646	0.38232	0.4955
C7	0.71556	0.38164	0.50008	C7	0.71524	0.38215	0.4987
C8	0.28456	0.6188	0.50106	C8	0.28523	0.61809	0.49901
C9	0.66655	0.28472	0.49996	C9	0.66613	0.28521	0.50087
C10	0.33336	0.71572	0.50209	C10	0.33411	0.71507	0.50104
C11	0.61854	0.33363	0.49936	C11	0.6182	0.33422	0.49495
C12	0.38151	0.66705	0.49953	C12	0.3823	0.66633	0.49592
C13	0.19647	0.57428	0.50114	C13	0.19703	0.5737	0.50123
C14	0.80365	0.42582	0.50004	C14	0.80351	0.42622	0.5005
C15	0.42584	0.6234	0.4937	C15	0.42647	0.62227	0.4898
C16	0.5744	0.37756	0.49836	C16	0.57409	0.37837	0.48869
C17	0.37723	0.80384	0.50103	C17	0.3778	0.80329	0.50139
C18	0.62262	0.19664	0.50038	C18	0.62207	0.19701	0.50169
C19	0.57418	0.1967	0.50014	C19	0.5736	0.19706	0.50127
C20	0.4257	0.80385	0.5013	C20	0.42637	0.80343	0.50078
C21	0.62305	0.42614	0.49882	C21	0.62279	0.42686	0.49016
C22	0.37731	0.57482	0.49247	C22	0.37776	0.57365	0.48996
C23	0.80358	0.3773	0.50011	C23	0.80336	0.37766	0.50114
C24	0.19631	0.62267	0.50108	C24	0.19698	0.62217	0.50173
C25	0.14987	0.52691	0.50067	C25	0.15025	0.52638	0.50123
C26	0.85039	0.47303	0.49997	C26	0.85044	0.47337	0.50069
C27	0.47299	0.62413	0.49035	C27	0.47344	0.62236	0.48853
C28	0.52735	0.3769	0.49761	C28	0.52718	0.37842	0.48736
C29	0.37679	0.85059	0.50008	C29	0.37711	0.84991	0.50069
C30	0.62304	0.1499	0.5005	C30	0.62243	0.15025	0.5011
C31	0.52689	0.15004	0.50029	C31	0.52627	0.15024	0.50133

C32	0.47296	0.85052	0.50053	C32	0.47351	0.85041	0.50072
C33	0.62385	0.47331	0.49736	C33	0.62321	0.47391	0.49093
C34	0.37666	0.52774	0.48859	C34	0.37734	0.52664	0.49043
C35	0.85025	0.37668	0.50004	C35	0.85001	0.37698	0.50059
C36	0.1495	0.62298	0.50032	C36	0.15019	0.6225	0.50106
C37	0.10438	0.52796	0.49959	C37	0.10472	0.52744	0.50032
C38	0.89574	0.47168	0.49949	C38	0.89585	0.47201	0.50017
C39	0.47191	0.57747	0.48691	C39	0.47258	0.57568	0.49023
C40	0.52853	0.42367	0.4969	C40	0.52802	0.42504	0.48994
C41	0.42348	0.89597	0.49921	C41	0.42369	0.89557	0.49968
C42	0.57632	0.10452	0.49992	C42	0.57571	0.10476	0.50025
C43	0.52805	0.10458	0.4999	C43	0.52736	0.10471	0.50044
C44	0.47174	0.89593	0.49938	C44	0.47214	0.89582	0.50006
C45	0.57714	0.47218	0.49569	C45	0.57664	0.47346	0.49246
C46	0.42337	0.52884	0.48719	C46	0.42393	0.52715	0.49273
C47	0.8957	0.42334	0.49937	C47	0.89561	0.42357	0.49968
C48	0.10421	0.57618	0.49942	C48	0.10472	0.57576	0.50019
C49	0.49454	0.49952	0.62871	C49	0.50158	0.50054	0.63676
H1	0.15053	0.49102	0.50093	H1	0.1508	0.49043	0.50103
H2	0.85001	0.50907	0.50018	H2	0.85018	0.50949	0.50053
H3	0.50898	0.66056	0.4913	H3	0.5096	0.65872	0.48874
H4	0.49131	0.34052	0.49756	H4	0.49108	0.3421	0.4863
H5	0.34043	0.85034	0.50036	H5	0.34061	0.8494	0.50061
H6	0.65943	0.15021	0.50065	H6	0.6588	0.15058	0.50101
H7	0.49087	0.15046	0.5005	H7	0.49026	0.1507	0.50103
H8	0.50892	0.84997	0.50064	H8	0.50962	0.85016	0.50048

H9	0.66025	0.50933	0.4981	H9	0.65968	0.50991	0.49289
H10	0.34028	0.49169	0.48807	H10	0.34094	0.49061	0.49151
H11	0.84974	0.34019	0.50042	H11	0.84948	0.34047	0.50077
H12	0.1497	0.65932	0.50064	H12	0.15046	0.65886	0.50079
H13	0.47202	0.51808	0.65033	H13	0.5016	0.47202	0.75034
N1	0.2412	0.57385	0.50116	N1	0.24172	0.57318	0.49976
N2	0.75903	0.42649	0.50004	N2	0.75887	0.42693	0.49925
N3	0.42637	0.66863	0.49749	N3	0.42714	0.66759	0.49258
N4	0.57377	0.3322	0.49865	N4	0.57338	0.33303	0.49083
N5	0.33193	0.75915	0.50183	N5	0.33262	0.75846	0.50215
N6	0.66793	0.24127	0.50031	N6	0.6674	0.2417	0.50221
N7	0.57363	0.24138	0.49976	N7	0.57309	0.24177	0.49973
N8	0.42633	0.75921	0.50179	N8	0.42711	0.75883	0.49957
N9	0.6683	0.42659	0.50002	N9	0.668	0.42723	0.49304
N10	0.33201	0.57418	0.49519	N10	0.33256	0.57329	0.49217
N11	0.75885	0.33206	0.50008	N11	0.75853	0.33249	0.50189
N12	0.24093	0.66804	0.50191	N12	0.24169	0.6675	0.50233
Ru1	0.50059	0.50089	0.49527	Ru1	0.50049	0.50051	0.52189
Ru2	0.4999	0.00025	0.49826	Ru2	0.49961	0.00024	0.49828
Ru3	0.00002	0.4996	0.49826	Ru3	0.00025	0.49951	0.49833
Ru ₃ (HATNA) ₂				Ru ₃ (HATNA) ₂			
	coordinates				coordinates		
*CHOH	x	y	z	*CH ₂ O	x	y	z
O1	0.05741	0.57059	0.49830	O1	0.05766	0.57044	0.49852
O2	0.94251	0.42913	0.49778	O2	0.94234	0.4292	0.49804

O3	0.4277	0.48684	0.48079	O3	0.42973	0.48759	0.47777
O4	0.5724	0.51384	0.50053	O4	0.57111	0.51354	0.48323
O5	0.5126	0.94279	0.49903	O5	0.51273	0.94274	0.49878
O6	0.48673	0.05795	0.49789	O6	0.48667	0.05798	0.49791
O7	0.57035	0.05764	0.49853	O7	0.57023	0.05784	0.49863
O8	0.42885	0.94276	0.49825	O8	0.42899	0.9425	0.49819
O9	0.4862	0.42752	0.49831	O9	0.48753	0.43004	0.48285
O10	0.51347	0.57249	0.48384	O10	0.51343	0.57142	0.47798
O11	0.94255	0.51294	0.49802	O11	0.94256	0.51297	0.49821
O12	0.05767	0.48693	0.49813	O12	0.05771	0.48681	0.49813
O13	0.51285	0.48264	0.68667	O13	0.52381	0.48937	0.6979
C1	0.38141	0.71577	0.50124	C1	0.38178	0.71552	0.50115
C2	0.61863	0.2848	0.50115	C2	0.61831	0.28513	0.50157
C3	0.28448	0.66679	0.50203	C3	0.28481	0.66647	0.50161
C4	0.71553	0.3336	0.50119	C4	0.71526	0.33393	0.5013
C5	0.33338	0.61878	0.4989	C5	0.33382	0.61856	0.49881
C6	0.6668	0.38175	0.49917	C6	0.66651	0.38214	0.50169
C7	0.7156	0.38167	0.50059	C7	0.71539	0.38207	0.50158
C8	0.28455	0.61879	0.50145	C8	0.28488	0.61846	0.50087
C9	0.6666	0.28473	0.50139	C9	0.66633	0.28506	0.50136
C10	0.33334	0.7157	0.50202	C10	0.33367	0.71542	0.50163
C11	0.61866	0.33363	0.49951	C11	0.61839	0.33407	0.50154
C12	0.38154	0.66698	0.49889	C12	0.38185	0.66665	0.49936
C13	0.19648	0.57439	0.50104	C13	0.19671	0.57402	0.50089
C14	0.80368	0.42588	0.50053	C14	0.80352	0.42619	0.50024
C15	0.42578	0.62313	0.49157	C15	0.42617	0.62291	0.49278

C16	0.57441	0.37741	0.49517	C16	0.5742	0.37804	0.49819
C17	0.37707	0.80384	0.50115	C17	0.37741	0.80355	0.50088
C18	0.62263	0.19662	0.50064	C18	0.62238	0.19689	0.50048
C19	0.57421	0.19675	0.50063	C19	0.57392	0.19696	0.50042
C20	0.42558	0.80388	0.50116	C20	0.42596	0.80369	0.50084
C21	0.62296	0.42598	0.49529	C21	0.62274	0.42654	0.4987
C22	0.37718	0.57455	0.491	C22	0.37772	0.57443	0.49164
C23	0.80362	0.37737	0.50037	C23	0.8034	0.37764	0.50014
C24	0.19636	0.62282	0.50101	C24	0.19664	0.62248	0.50103
C25	0.14987	0.52707	0.50022	C25	0.14998	0.52673	0.50019
C26	0.8504	0.47312	0.50005	C26	0.85035	0.47335	0.49973
C27	0.4728	0.62368	0.48802	C27	0.47346	0.62356	0.4886
C28	0.52734	0.37681	0.49387	C28	0.52705	0.37763	0.49417
C29	0.37653	0.85055	0.50031	C29	0.37678	0.85024	0.50011
C30	0.62293	0.14981	0.49998	C30	0.62275	0.15008	0.49995
C31	0.5269	0.15013	0.49968	C31	0.52664	0.15023	0.49952
C32	0.47279	0.8506	0.50065	C32	0.47314	0.8505	0.50028
C33	0.62338	0.47299	0.49485	C33	0.6234	0.47382	0.49514
C34	0.37661	0.52757	0.48601	C34	0.37735	0.5273	0.48657
C35	0.85032	0.37685	0.49952	C35	0.85007	0.37699	0.49946
C36	0.14954	0.62313	0.50021	C36	0.14985	0.62288	0.50034
C37	0.10437	0.52813	0.49922	C37	0.1045	0.52791	0.49922
C38	0.89577	0.47183	0.49897	C38	0.8957	0.47196	0.49886
C39	0.47191	0.57696	0.4865	C39	0.47234	0.57702	0.48303
C40	0.52816	0.42348	0.49452	C40	0.52847	0.42436	0.48934
C41	0.4232	0.896	0.49943	C41	0.42339	0.89574	0.4992

C42	0.57618	0.10447	0.49915	C42	0.57604	0.10466	0.49917
C43	0.52795	0.10464	0.49887	C43	0.52777	0.10474	0.49881
C44	0.47151	0.89599	0.49979	C44	0.47175	0.89587	0.49943
C45	0.57662	0.47203	0.49549	C45	0.5768	0.47265	0.48961
C46	0.4233	0.52839	0.48495	C46	0.42405	0.52867	0.48248
C47	0.89576	0.4235	0.49875	C47	0.89558	0.42359	0.49876
C48	0.10422	0.57637	0.49925	C48	0.10445	0.57619	0.49936
C49	0.49526	0.50187	0.62588	C49	0.48778	0.49233	0.66681
H1	0.15046	0.49114	0.5002	H1	0.15046	0.49074	0.50007
H2	0.85002	0.50916	0.50025	H2	0.85013	0.50948	0.50004
H3	0.50888	0.66006	0.4887	H3	0.50936	0.6601	0.4893
H4	0.49133	0.34033	0.49373	H4	0.49089	0.34129	0.494
H5	0.34016	0.8503	0.50035	H5	0.34028	0.84973	0.50019
H6	0.65927	0.15	0.50014	H6	0.65917	0.15044	0.50013
H7	0.49097	0.15072	0.4994	H7	0.49067	0.15076	0.49939
H8	0.50884	0.85026	0.50076	H8	0.50926	0.85029	0.5005
H9	0.65978	0.50909	0.49558	H9	0.6599	0.50972	0.49555
H10	0.34023	0.49148	0.48508	H10	0.34099	0.49112	0.48607
H11	0.85	0.34045	0.49931	H11	0.84954	0.34049	0.49939
H12	0.1496	0.6594	0.50042	H12	0.15023	0.6593	0.5006
H13	0.47581	0.52065	0.65788	H13	0.48753	0.52939	0.66477
H14	0.53017	0.46581	0.65904	H14	0.45189	0.45766	0.64358
N1	0.24116	0.57387	0.50139	N1	0.24147	0.57354	0.5009
N2	0.75905	0.42653	0.50067	N2	0.7589	0.4269	0.501
N3	0.42633	0.66844	0.4957	N3	0.42672	0.66811	0.49701
N4	0.57385	0.33212	0.49735	N4	0.57355	0.33271	0.50034

N5	0.33183	0.75911	0.50193	N5	0.33216	0.75882	0.50156
N6	0.66798	0.24126	0.50124	N6	0.66769	0.24156	0.50095
N7	0.57369	0.24143	0.50115	N7	0.5734	0.2417	0.50112
N8	0.42625	0.75926	0.50122	N8	0.42662	0.75903	0.50103
N9	0.66829	0.42657	0.49701	N9	0.66795	0.42702	0.50099
N10	0.33189	0.574	0.49522	N10	0.33244	0.57374	0.49532
N11	0.75893	0.33211	0.50106	N11	0.75865	0.33242	0.50065
N12	0.24099	0.66815	0.50179	N12	0.24129	0.66779	0.50172
Ru1	0.49961	0.50029	0.50208	Ru1	0.50056	0.50074	0.47815
Ru2	0.49958	0.00029	0.498	Ru2	0.49957	0.00024	0.49802
Ru3	0.00003	0.49985	0.49754	Ru3	0.00005	0.49981	0.49783

Ru ₃ (HATNA) ₂				Ru ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*CH ₂ OH	x	y	z	*+CH ₃ OH	x	y	z
O1	0.05766	0.57072	0.50023	O1	0.05767	0.57102	0.49754
O2	0.94223	0.42941	0.50021	O2	0.94222	0.4298	0.49799
O3	0.42744	0.48551	0.48721	O3	0.42912	0.4868	0.47599
O4	0.57066	0.51308	0.49407	O4	0.57031	0.51272	0.47406
O5	0.51317	0.94244	0.49984	O5	0.51332	0.9423	0.49798
O6	0.48685	0.05758	0.49982	O6	0.4871	0.05747	0.49844
O7	0.57067	0.05769	0.50018	O7	0.57086	0.05768	0.49779
O8	0.42935	0.94232	0.50022	O8	0.42964	0.94225	0.49772
O9	0.48549	0.42748	0.48375	O9	0.4867	0.42904	0.47293
O10	0.51285	0.5705	0.4943	O10	0.5128	0.57043	0.47644
O11	0.94234	0.51324	0.49991	O11	0.94222	0.51343	0.49852

O12	0.05752	0.4869	0.49979	O12	0.05739	0.48724	0.49774
O13	0.51795	0.46959	0.67494	O13	0.51735	0.46824	0.70745
C1	0.3817	0.71523	0.50201	C1	0.38181	0.71506	0.50258
C2	0.61824	0.28471	0.50201	C2	0.61805	0.28471	0.50153
C3	0.28473	0.66638	0.50122	C3	0.28482	0.66622	0.50293
C4	0.71515	0.33372	0.50122	C4	0.71505	0.33379	0.50303
C5	0.33349	0.61831	0.50183	C5	0.33359	0.61804	0.5007
C6	0.66618	0.38164	0.50197	C6	0.66605	0.38173	0.49948
C7	0.7151	0.38174	0.50206	C7	0.715	0.38183	0.50218
C8	0.28467	0.61833	0.50213	C8	0.28469	0.61809	0.50232
C9	0.66629	0.28478	0.50124	C9	0.66616	0.28482	0.50273
C10	0.33366	0.71524	0.50119	C10	0.33377	0.71511	0.50312
C11	0.61816	0.3335	0.50156	C11	0.61801	0.33359	0.49889
C12	0.38162	0.6663	0.50178	C12	0.38172	0.6661	0.50097
C13	0.19653	0.57399	0.50054	C13	0.1965	0.57399	0.50149
C14	0.80328	0.42611	0.50045	C14	0.80318	0.42624	0.50199
C15	0.42561	0.62217	0.4973	C15	0.42593	0.62221	0.49453
C16	0.57366	0.37707	0.49637	C16	0.57376	0.37738	0.49001
C17	0.37758	0.80338	0.49995	C17	0.37771	0.80326	0.50167
C18	0.62245	0.19664	0.50007	C18	0.62245	0.19665	0.50145
C19	0.57393	0.19658	0.50058	C19	0.57394	0.19654	0.5014
C20	0.42606	0.80339	0.50045	C20	0.42617	0.80325	0.50176
C21	0.62203	0.42559	0.49788	C21	0.62216	0.42589	0.49089
C22	0.37705	0.57383	0.49702	C22	0.37743	0.57376	0.49399
C23	0.80327	0.37762	0.49994	C23	0.80322	0.37779	0.50196
C24	0.19659	0.62251	0.49996	C24	0.19663	0.62251	0.50123

C25	0.14976	0.52674	0.49989	C25	0.14965	0.52682	0.50044
C26	0.85008	0.47336	0.49986	C26	0.84993	0.47354	0.50119
C27	0.47262	0.62229	0.4948	C27	0.47314	0.62274	0.48964
C28	0.52644	0.37649	0.49135	C28	0.52652	0.37676	0.48393
C29	0.3771	0.85012	0.49958	C29	0.37726	0.85003	0.5002
C30	0.62293	0.14991	0.49962	C30	0.62307	0.14996	0.50011
C31	0.5267	0.14981	0.5	C31	0.52675	0.14972	0.50068
C32	0.4733	0.85018	0.49988	C32	0.47343	0.85	0.50067
C33	0.6221	0.47258	0.49589	C33	0.6227	0.47309	0.48589
C34	0.37642	0.52655	0.49322	C34	0.37683	0.52653	0.48854
C35	0.85001	0.37716	0.49959	C35	0.84999	0.37736	0.50074
C36	0.14985	0.62296	0.49957	C36	0.14997	0.62318	0.49967
C37	0.10432	0.52795	0.49963	C37	0.10428	0.52821	0.49891
C38	0.89554	0.47215	0.49967	C38	0.8954	0.47234	0.49982
C39	0.47138	0.57552	0.49341	C39	0.4718	0.57611	0.48322
C40	0.52715	0.42295	0.48961	C40	0.52782	0.42337	0.47834
C41	0.42375	0.89559	0.49974	C41	0.42395	0.89547	0.49898
C42	0.57625	0.10442	0.49975	C42	0.57646	0.10444	0.49897
C43	0.52791	0.10438	0.49971	C43	0.5281	0.10432	0.49941
C44	0.47208	0.89563	0.49966	C44	0.47226	0.89548	0.49923
C45	0.57541	0.47138	0.49335	C45	0.57607	0.47174	0.47938
C46	0.42289	0.5273	0.49137	C46	0.42347	0.52782	0.48281
C47	0.89549	0.4238	0.49972	C47	0.89542	0.42405	0.49947
C48	0.10439	0.5763	0.49972	C48	0.10442	0.57658	0.49861
C49	0.50136	0.50066	0.63691	C49	0.49376	0.49946	0.70757
H1	0.15021	0.49072	0.49988	H1	0.14989	0.4907	0.50062

H2	0.84972	0.50942	0.49986	H2	0.84947	0.50954	0.50095
H3	0.50874	0.65863	0.49484	H3	0.50926	0.65912	0.48978
H4	0.49049	0.33997	0.48973	H4	0.49054	0.34025	0.48354
H5	0.34065	0.84968	0.49973	H5	0.34085	0.84969	0.5003
H6	0.65936	0.15031	0.49969	H6	0.65958	0.1505	0.50042
H7	0.49067	0.15023	0.49999	H7	0.49064	0.15	0.50053
H8	0.50936	0.8498	0.49987	H8	0.50943	0.84952	0.50052
H9	0.65839	0.50879	0.49646	H9	0.65911	0.50914	0.4873
H10	0.33987	0.49065	0.49231	H10	0.34038	0.49046	0.48797
H11	0.8496	0.34072	0.49972	H11	0.84962	0.34094	0.50106
H12	0.15027	0.6594	0.49972	H12	0.15048	0.65968	0.49965
H13	0.46088	0.48547	0.65445	H13	0.45436	0.47896	0.68039
H14	0.55536	0.48729	0.67528	H14	0.51448	0.45459	0.64761
H15	0.52574	0.54186	0.65103	H15	0.51647	0.53551	0.66965
N1	0.2412	0.5734	0.5018	H16	0.49194	0.50929	0.77734
N2	0.75858	0.42666	0.50166	N1	0.24115	0.57329	0.5021
N3	0.42642	0.66754	0.50004	N2	0.75842	0.42672	0.50217
N4	0.5732	0.33191	0.49924	N3	0.42655	0.66746	0.49863
N5	0.33229	0.75872	0.50018	N4	0.57318	0.33216	0.49454
N6	0.66773	0.24134	0.5003	N5	0.33242	0.75859	0.50277
N7	0.57332	0.24123	0.50173	N6	0.66765	0.24141	0.5027
N8	0.42662	0.75869	0.50162	N7	0.57324	0.24119	0.50145
N9	0.66739	0.42645	0.50093	N8	0.4267	0.75852	0.50234
N10	0.3319	0.57333	0.5	N9	0.66741	0.42654	0.49608
N11	0.75862	0.33234	0.50021	N10	0.33218	0.5732	0.49779
N12	0.24128	0.66779	0.50018	N11	0.75855	0.33247	0.50294

Ru1	0.49857	0.49846	0.49583	N12	0.24141	0.66771	0.50244
Ru2	0.50002	0	0.50031	Ru1	0.49976	0.49983	0.47103
Ru3	- 0.00006	0.50008	0.50036	Ru2	0.50029	- 0.00007	0.49739
				Ru3	0.99987	0.5004	0.49734
Ru ₃ (HATNA) ₂				Ru ₃ (HATNA) ₂			
	coordinates				coordinates		
*CH	x	y	z	*H	x	y	z
O1	0.05794	0.57045	0.49846	O1	0.05751	0.57065	0.50000
O2	0.94146	0.42936	0.49871	O2	0.94250	0.42937	0.50000
O3	0.42831	0.48529	0.48818	O3	0.42914	0.48744	0.49960
O4	0.57137	0.51594	0.50079	O4	0.57166	0.5132	0.49291
O5	0.51304	0.94286	0.49861	O5	0.51305	0.94243	0.50001
O6	0.48615	0.05794	0.49849	O6	0.48693	0.05755	0.49999
O7	0.57005	0.05857	0.49955	O7	0.57063	0.05748	0.49997
O8	0.42904	0.94211	0.49796	O8	0.42935	0.94248	0.50005
O9	0.48434	0.42892	0.50042	O9	0.48753	0.42917	0.49934
O10	0.51539	0.57241	0.48997	O10	0.5132	0.57161	0.49305
O11	0.94227	0.51334	0.49820	O11	0.94244	0.51306	0.50002
O12	0.05748	0.48662	0.49836	O12	0.05756	0.48694	0.49998
C1	0.38239	0.71505	0.49697	C1	0.38145	0.71543	0.50066
C2	0.61711	0.28575	0.49823	C2	0.61854	0.28454	0.50061
C3	0.28524	0.66587	0.50039	C3	0.28454	0.66654	0.50015
C4	0.71425	0.33464	0.49953	C4	0.71548	0.3334	0.50019
C5	0.33415	0.61795	0.49144	C5	0.33339	0.61846	0.50067
C6	0.66545	0.38287	0.49677	C6	0.66666	0.38145	0.50110

C7	0.71439	0.38288	0.49837	C7	0.71546	0.38142	0.50071
C8	0.28523	0.61777	0.49691	C8	0.28456	0.61851	0.50051
C9	0.66527	0.28574	0.49959	C9	0.66657	0.28452	0.5002
C10	0.33419	0.7149	0.50029	C10	0.33343	0.71545	0.50017
C11	0.61723	0.3347	0.49659	C11	0.6185	0.33337	0.50076
C12	0.38235	0.66621	0.49173	C12	0.38148	0.66663	0.50101
C13	0.19691	0.57356	0.50014	C13	0.19647	0.57415	0.49992
C14	0.80276	0.42684	0.4994	C14	0.80355	0.42583	0.49988
C15	0.42673	0.6224	0.48268	C15	0.42584	0.6229	0.49983
C16	0.57289	0.37873	0.49417	C16	0.57434	0.37732	0.49927
C17	0.37785	0.80318	0.50119	C17	0.37737	0.80356	0.49983
C18	0.62143	0.19748	0.50012	C18	0.62263	0.1964	0.49982
C19	0.57289	0.19739	0.49918	C19	0.57417	0.19645	0.49992
C20	0.42641	0.80338	0.50006	C20	0.42584	0.80353	0.49989
C21	0.62154	0.42735	0.49447	C21	0.62293	0.42581	0.49969
C22	0.37813	0.57376	0.4819	C22	0.37734	0.57431	0.49944
C23	0.80249	0.37823	0.49995	C23	0.80359	0.37735	0.49981
C24	0.197	0.62208	0.50157	C24	0.19643	0.62262	0.49985
C25	0.14993	0.52637	0.50008	C25	0.14977	0.52687	0.49989
C26	0.84983	0.47397	0.49921	C26	0.85024	0.47312	0.49985
C27	0.47383	0.62267	0.48242	C27	0.47309	0.62361	0.49831
C28	0.52587	0.37861	0.49496	C28	0.52727	0.37687	0.49807
C29	0.37712	0.84979	0.50069	C29	0.37694	0.85031	0.49997
C30	0.62204	0.15081	0.50064	C30	0.62305	0.14965	0.49997
C31	0.52566	0.15038	0.49895	C31	0.52688	0.14977	0.49987
C32	0.47354	0.85041	0.50019	C32	0.47312	0.85023	0.49985

C33	0.62167	0.4744	0.49568	C33	0.62363	0.47305	0.49806
C34	0.37799	0.52675	0.48049	C34	0.37689	0.52723	0.49845
C35	0.84913	0.37751	0.50006	C35	0.85034	0.37693	0.49996
C36	0.15029	0.62263	0.50137	C36	0.14968	0.62305	0.49997
C37	0.10443	0.52756	0.49964	C37	0.10433	0.52806	0.49995
C38	0.89524	0.47257	0.49893	C38	0.89568	0.47194	0.49994
C39	0.4731	0.5761	0.48554	C39	0.47203	0.57698	0.49672
C40	0.52661	0.42522	0.49711	C40	0.52851	0.4237	0.49771
C41	0.4237	0.89552	0.49949	C41	0.42364	0.89571	0.50001
C42	0.5754	0.10515	0.49986	C42	0.57634	0.10427	0.50000
C43	0.52697	0.10492	0.49917	C43	0.52805	0.10432	0.49994
C44	0.47218	0.89584	0.49965	C44	0.47193	0.89567	0.49994
C45	0.57507	0.47366	0.4974	C45	0.57701	0.47202	0.49641
C46	0.42459	0.52755	0.48447	C46	0.42369	0.52845	0.49811
C47	0.89488	0.42408	0.49928	C47	0.89573	0.42365	0.50000
C48	0.10461	0.57597	0.4999	C48	0.10430	0.57635	0.50001
C49	0.49632	0.50329	0.63929	H1	0.15024	0.49087	0.49995
H1	0.15029	0.4903	0.49936	H2	0.84975	0.50910	0.49993
H2	0.84964	0.51013	0.49882	H3	0.50897	0.66015	0.49909
H3	0.50992	0.65905	0.48358	H4	0.49125	0.34042	0.49803
H4	0.48973	0.34229	0.49584	H5	0.34053	0.84996	0.50003
H5	0.34059	0.8492	0.50074	H6	0.65946	0.15001	0.50002
H6	0.65848	0.1512	0.50167	H7	0.49089	0.15025	0.49995
H7	0.48952	0.1506	0.49803	H8	0.50912	0.84975	0.49993
H8	0.50967	0.85018	0.49988	H9	0.66021	0.50895	0.49904
H9	0.65798	0.51058	0.49707	H10	0.34047	0.49122	0.49831

H10	0.34165	0.49059	0.47982	H11	0.85000	0.34053	0.50003
H11	0.84857	0.34097	0.50083	H12	0.15004	0.65946	0.50001
H12	0.1508	0.65913	0.50172	H13	0.49325	0.49337	0.60456
H13	0.49372	0.50509	0.71197	N1	0.24114	0.57361	0.50022
N1	0.24155	0.57291	0.49775	N2	0.75887	0.42635	0.50024
N2	0.75816	0.42768	0.49874	N3	0.42636	0.66815	0.50087
N3	0.42715	0.66757	0.48647	N4	0.57369	0.33196	0.49997
N4	0.57239	0.33348	0.49486	N5	0.33205	0.75892	0.49971
N5	0.33265	0.75827	0.50214	N6	0.66794	0.24104	0.4997
N6	0.66669	0.24229	0.50048	N7	0.57364	0.24113	0.50025
N7	0.57227	0.24207	0.49831	N8	0.42637	0.75885	0.50024
N8	0.42717	0.7588	0.4978	N9	0.66819	0.42635	0.50092
N9	0.66681	0.42782	0.4953	N10	0.33198	0.57366	0.49995
N10	0.33285	0.57316	0.48542	N11	0.75895	0.33203	0.49968
N11	0.75762	0.33307	0.50035	N12	0.24108	0.66793	0.49973
N12	0.24183	0.66732	0.50247	Ru1	0.50085	0.50084	0.50099
Ru1	0.49921	0.5011	0.52661	Ru2	0.49999	- 0.00001	0.49997
Ru2	0.49956	0.00035	0.49814	Ru3	0.00001	0.50001	0.49997
Ru3	- 0.00023	0.49986	0.49784				

Rh ₃ (HATNA) ₂				Rh ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*OCHO	x	y	z	*COOH	x	y	z
O1	0.05683	0.57187	0.50016	O1	0.05688	0.57198	0.50022
O2	0.94292	0.42795	0.49987	O2	0.94313	0.42801	0.50024
O3	0.42958	0.4868	0.50979	O3	0.42744	0.48556	0.48950

O4	0.57398	0.51586	0.49232	O4	0.57315	0.51491	0.49137
O5	0.51485	0.94286	0.49984	O5	0.51502	0.94313	0.50002
O6	0.48492	0.05673	0.50004	O6	0.48494	0.0569	0.50000
O7	0.57188	0.0568	0.49986	O7	0.57197	0.05689	0.50025
O8	0.42796	0.94288	0.49976	O8	0.428	0.94313	0.50022
O9	0.48682	0.42949	0.50996	O9	0.48566	0.42743	0.4878
O10	0.51591	0.57396	0.49218	O10	0.51492	0.57304	0.49267
O11	0.94289	0.51484	0.50013	O11	0.94312	0.51503	0.50002
O12	0.05676	0.48491	0.50011	O12	0.05689	0.48496	0.50000
O13	0.48827	0.48659	0.77636	O13	0.52994	0.5303	0.67703
O14	0.51382	0.5142	0.63927	O14	0.45617	0.4531	0.65774
C1	0.38165	0.71541	0.49919	C1	0.3817	0.71565	0.50093
C2	0.61797	0.28438	0.49994	C2	0.61833	0.28442	0.50116
C3	0.28439	0.66624	0.49977	C3	0.28437	0.66659	0.50048
C4	0.71539	0.33333	0.49974	C4	0.71566	0.33341	0.50046
C5	0.3334	0.61789	0.5003	C5	0.33334	0.61826	0.50103
C6	0.66658	0.38176	0.49839	C6	0.66676	0.38178	0.50109
C7	0.71545	0.38161	0.49919	C7	0.71565	0.38169	0.50102
C8	0.28441	0.61791	0.49989	C8	0.28442	0.61832	0.50107
C9	0.6663	0.28437	0.4998	C9	0.6666	0.28438	0.50052
C10	0.33335	0.71534	0.4997	C10	0.33341	0.71566	0.50043
C11	0.61796	0.33337	0.50035	C11	0.61827	0.33333	0.50113
C12	0.3818	0.66652	0.49845	C12	0.3818	0.66675	0.50094
C13	0.19585	0.57347	0.49984	C13	0.1959	0.57374	0.50018
C14	0.8039	0.42613	0.50009	C14	0.80415	0.42625	0.50014
C15	0.42673	0.62299	0.4973	C15	0.4264	0.62283	0.49854

C16	0.574	0.37797	0.50221	C16	0.57387	0.37742	0.49812
C17	0.37737	0.80384	0.5001	C17	0.37748	0.80418	0.49984
C18	0.62227	0.19583	0.50002	C18	0.62247	0.19586	0.49985
C19	0.57351	0.19583	0.49986	C19	0.57373	0.19591	0.5002
C20	0.42615	0.80387	0.50005	C20	0.42623	0.80415	0.50015
C21	0.62305	0.42669	0.49708	C21	0.62287	0.42638	0.49847
C22	0.37801	0.57393	0.50228	C22	0.37746	0.57385	0.49831
C23	0.80389	0.37735	0.50013	C23	0.80418	0.37749	0.49982
C24	0.19586	0.62224	0.49998	C24	0.19585	0.62248	0.49985
C25	0.14884	0.52612	0.49983	C25	0.14895	0.52633	0.49993
C26	0.85083	0.47353	0.50025	C26	0.85107	0.47366	0.49990
C27	0.47409	0.62405	0.49408	C27	0.47356	0.62348	0.49650
C28	0.52719	0.37801	0.50697	C28	0.5268	0.37689	0.49481
C29	0.37704	0.85082	0.50002	C29	0.37715	0.85113	0.49978
C30	0.62268	0.14888	0.50007	C30	0.62279	0.1489	0.49977
C31	0.52616	0.14882	0.49983	C31	0.52632	0.14896	0.49992
C32	0.47354	0.85081	0.50013	C32	0.47365	0.85107	0.49994
C33	0.62408	0.47404	0.49382	C33	0.62353	0.47354	0.49616
C34	0.37806	0.52713	0.50693	C34	0.37693	0.52677	0.4954
C35	0.85087	0.37702	0.50008	C35	0.85113	0.37716	0.49976
C36	0.14892	0.62268	0.50009	C36	0.14889	0.62281	0.49977
C37	0.10282	0.52704	0.49993	C37	0.10291	0.52715	0.49988
C38	0.89686	0.47268	0.5001	C38	0.8971	0.47285	0.49986
C39	0.47391	0.57736	0.49747	C39	0.47294	0.57654	0.49434
C40	0.52849	0.42524	0.5058	C40	0.52761	0.42391	0.49213
C41	0.424	0.89685	0.49982	C41	0.42412	0.89714	0.49993

C42	0.57576	0.10281	0.49986	C42	0.57584	0.10288	0.49993
C43	0.52704	0.1028	0.49987	C43	0.52713	0.10293	0.49988
C44	0.47269	0.89682	0.49991	C44	0.47284	0.8971	0.49988
C45	0.5774	0.47385	0.49735	C45	0.5766	0.4729	0.49352
C46	0.42532	0.52844	0.50583	C46	0.42393	0.52753	0.49314
C47	0.89689	0.424	0.49996	C47	0.89714	0.42414	0.49992
C48	0.10284	0.57575	0.5	C48	0.10287	0.57585	0.49993
C49	0.48086	0.47859	0.69647	C49	0.498	0.4971	0.62969
H1	0.14911	0.48983	0.49985	H1	0.1493	0.49009	0.49992
H2	0.85039	0.50973	0.50029	H2	0.85065	0.50986	0.4999
H3	0.51007	0.66074	0.48967	H3	0.50981	0.66005	0.49687
H4	0.49074	0.34174	0.51146	H4	0.49051	0.34036	0.49441
H5	0.34049	0.85057	0.50018	H5	0.34062	0.8509	0.49996
H6	0.65927	0.1492	0.50026	H6	0.65933	0.14915	0.49995
H7	0.48989	0.14913	0.49987	H7	0.49009	0.14932	0.49991
H8	0.50974	0.85037	0.50019	H8	0.50985	0.85065	0.49993
H9	0.66078	0.51002	0.48937	H9	0.66008	0.50978	0.49678
H10	0.34181	0.49068	0.51126	H10	0.34039	0.49048	0.49504
H11	0.85065	0.34048	0.50019	H11	0.85089	0.34063	0.49996
H12	0.14925	0.65927	0.50032	H12	0.14913	0.65934	0.49996
H13	0.44851	0.44337	0.66651	H13	0.45701	0.45406	0.72328
N1	0.24065	0.57279	0.49978	N1	0.24071	0.57315	0.50087
N2	0.75912	0.42675	0.49966	N2	0.75935	0.42685	0.5008
N3	0.42691	0.66835	0.49618	N3	0.42684	0.6683	0.5004
N4	0.57308	0.33219	0.50269	N4	0.57329	0.33188	0.50039
N5	0.33188	0.75901	0.50013	N5	0.33198	0.75934	0.49989

N6	0.66773	0.24069	0.49997	N6	0.66799	0.24068	0.49987
N7	0.57285	0.24064	0.49984	N7	0.57315	0.24072	0.50092
N8	0.42679	0.75908	0.49968	N8	0.42684	0.75935	0.50075
N9	0.6684	0.42687	0.49595	N9	0.66833	0.42682	0.5006
N10	0.33224	0.57302	0.50267	N10	0.33191	0.57327	0.50038
N11	0.75906	0.33186	0.50017	N11	0.75935	0.33198	0.49986
N12	0.24072	0.66769	0.49991	N12	0.24068	0.668	0.49989
Rh1	0.50233	0.50229	0.50951	Rh1	0.50023	0.50012	0.49592
Rh2	0.49991	- 0.00018	0.49997	Rh2	0.49998	0.00001	0.50026
Rh3	- 0.00015	0.4999	0.50019	Rh3	0.00000	0.50000	0.50024

Rh ₃ (HATNA) ₂				coordinates	Rh ₃ (HATNA) ₂				coordinates
*CO	x	y	z		*HCOOH	x	y	z	
O1	0.05695	0.57200	0.49990		O1	0.05677	0.57208	0.50335	
O2	0.94313	0.42799	0.49978		O2	0.94302	0.42803	0.50197	
O3	0.42723	0.48501	0.49112		O3	0.42757	0.48534	0.47679	
O4	0.57325	0.51530	0.49226		O4	0.57164	0.51283	0.49295	
O5	0.51498	0.94311	0.49996		O5	0.51513	0.9424	0.50412	
O6	0.48497	0.05691	0.49997		O6	0.48519	0.05618	0.50248	
O7	0.57196	0.0569	0.49981		O7	0.57234	0.05628	0.50365	
O8	0.42795	0.94307	0.49984		O8	0.42813	0.94258	0.50271	
O9	0.48504	0.42714	0.48977		O9	0.48461	0.42588	0.47328	
O10	0.51538	0.57317	0.49343		O10	0.51509	0.57233	0.50319	
O11	0.94315	0.51499	0.49988		O11	0.94274	0.51496	0.50389	
O12	0.05694	0.485	0.50008		O12	0.05669	0.485	0.50100	

O13	0.49865	0.49723	0.70633	O13	0.50015	0.48984	0.63108
C1	0.38174	0.71562	0.50065	O14	0.54273	0.5766	0.6606
C2	0.61834	0.28445	0.50051	C1	0.38139	0.71505	0.50161
C3	0.28442	0.6666	0.50076	C2	0.61818	0.28345	0.49781
C4	0.71566	0.33339	0.50095	C3	0.28415	0.66621	0.49968
C5	0.33344	0.61833	0.49899	C4	0.71549	0.33274	0.50046
C6	0.66674	0.38172	0.4992	C5	0.33311	0.61795	0.49449
C7	0.71564	0.38171	0.50077	C6	0.66612	0.3806	0.50016
C8	0.28449	0.6183	0.50046	C7	0.71521	0.38087	0.50163
C9	0.66663	0.28437	0.50089	C8	0.2841	0.61795	0.49734
C10	0.33342	0.71562	0.50081	C9	0.66655	0.28362	0.49973
C11	0.61837	0.33338	0.49883	C10	0.33317	0.71518	0.50052
C12	0.38177	0.66673	0.49928	C11	0.61785	0.33212	0.49535
C13	0.19596	0.57374	0.50059	C12	0.38128	0.66615	0.50013
C14	0.80416	0.42623	0.50075	C13	0.19564	0.57352	0.49891
C15	0.42637	0.62287	0.49499	C14	0.80375	0.42582	0.50226
C16	0.57397	0.3774	0.49347	C15	0.42572	0.62231	0.49699
C17	0.37748	0.80413	0.50035	C16	0.57313	0.3758	0.48716
C18	0.6225	0.19586	0.5004	C17	0.37744	0.80367	0.50135
C19	0.57376	0.19592	0.50067	C18	0.62265	0.19512	0.50031
C20	0.42624	0.80411	0.50066	C19	0.57384	0.19503	0.49925
C21	0.62287	0.42627	0.49425	C20	0.42613	0.8035	0.50253
C22	0.3775	0.57395	0.49435	C21	0.62171	0.4246	0.49642
C23	0.80419	0.37748	0.50045	C22	0.37743	0.57398	0.48518
C24	0.1959	0.62249	0.50034	C23	0.80401	0.37718	0.50087
C25	0.149	0.52636	0.5005	C24	0.19568	0.6223	0.50038

C26	0.85109	0.47363	0.50051	C25	0.14869	0.5262	0.49908
C27	0.47357	0.62324	0.49463	C26	0.85066	0.47329	0.50296
C28	0.52683	0.37708	0.49167	C27	0.47285	0.62233	0.50311
C29	0.37713	0.85107	0.49997	C28	0.52609	0.3753	0.47863
C30	0.62284	0.14892	0.5	C29	0.37723	0.85066	0.50109
C31	0.52637	0.14898	0.50054	C30	0.62309	0.14827	0.50138
C32	0.47362	0.85106	0.50048	C31	0.52648	0.14808	0.49971
C33	0.62325	0.47345	0.49359	C32	0.47357	0.85039	0.50332
C34	0.37719	0.5268	0.49292	C33	0.6218	0.47146	0.49952
C35	0.85113	0.37714	0.49997	C34	0.37763	0.52736	0.4758
C36	0.14896	0.62285	0.50001	C35	0.85105	0.37706	0.50032
C37	0.10296	0.52719	0.50018	C36	0.14877	0.62276	0.50159
C38	0.89712	0.47281	0.50007	C37	0.10271	0.52719	0.50084
C39	0.47278	0.57639	0.49348	C38	0.8968	0.47266	0.50293
C40	0.52763	0.42391	0.49105	C39	0.47208	0.57609	0.49606
C41	0.42409	0.89711	0.49994	C40	0.52639	0.42202	0.48098
C42	0.57587	0.10289	0.49995	C41	0.42422	0.89662	0.50248
C43	0.52717	0.10294	0.50014	C42	0.57615	0.10218	0.50215
C44	0.47279	0.89708	0.50012	C43	0.52743	0.10216	0.50141
C45	0.57642	0.47268	0.49225	C44	0.47284	0.89646	0.50341
C46	0.42405	0.52762	0.49243	C45	0.57509	0.47073	0.49195
C47	0.89717	0.42411	0.49989	C46	0.42441	0.52785	0.48156
C48	0.10292	0.57589	0.49998	C47	0.89701	0.42408	0.50176
C49	0.49925	0.49846	0.62922	C48	0.10275	0.57589	0.50215
H1	0.14938	0.49013	0.50053	C49	0.52298	0.52865	0.68158
H2	0.85069	0.50984	0.50055	H1	0.14889	0.48988	0.49788

H3	0.50983	0.65979	0.49558	H2	0.85018	0.50946	0.50354
H4	0.49057	0.34055	0.49177	H3	0.50875	0.65868	0.51189
H5	0.34059	0.85082	0.49996	H4	0.49028	0.33874	0.47076
H6	0.65938	0.14917	0.49999	H5	0.34073	0.85045	0.49955
H7	0.49016	0.14939	0.50056	H6	0.65965	0.14856	0.50178
H8	0.50984	0.85068	0.50053	H7	0.4902	0.14837	0.49884
H9	0.65977	0.50972	0.49479	H8	0.50977	0.84997	0.50396
H10	0.34067	0.49052	0.49292	H9	0.65804	0.50762	0.50668
H11	0.85089	0.34061	0.49995	H10	0.34146	0.49136	0.46617
H12	0.14923	0.6594	0.50002	H11	0.85088	0.34057	0.49878
N1	0.24075	0.57313	0.5007	H12	0.14922	0.65939	0.50162
N2	0.75937	0.42686	0.501	H13	0.5263	0.52078	0.75219
N3	0.42693	0.66829	0.49723	H14	0.53511	0.58061	0.59215
N4	0.5733	0.33191	0.49587	N1	0.24047	0.57283	0.49717
N5	0.33197	0.75929	0.50063	N2	0.7588	0.42619	0.50258
N6	0.66804	0.2407	0.50078	N3	0.42642	0.66757	0.50231
N7	0.57315	0.24072	0.50077	N4	0.5728	0.33043	0.48802
N8	0.42689	0.75934	0.50087	N5	0.33185	0.75891	0.50036
N9	0.6683	0.42686	0.49698	N6	0.66811	0.24002	0.50061
N10	0.332	0.57327	0.49638	N7	0.57305	0.2397	0.49785
N11	0.75934	0.33195	0.50077	N8	0.42667	0.75867	0.50263
N12	0.24074	0.66802	0.50065	N9	0.66726	0.42546	0.50178
Rh1	0.50014	0.50002	0.50785	N10	0.33179	0.57319	0.48534
Rh2	0.49995	0	0.49986	N11	0.75928	0.33153	0.50008
Rh3	0.00004	0.49999	0.49988	N12	0.24051	0.66773	0.50074
				Rh1	0.49862	0.49752	0.49604

				Rh2	0.50022	- 0.00065	0.50381
				Rh3	- 0.00018	0.50006	0.50298
Rh ₃ (HATNA) ₂				Rh ₃ (HATNA) ₂			
	coordinates				coordinates		
*CHO	x	y	z	*COH	x	y	z
O1	0.05685	0.57183	0.49986	O1	0.05769	0.57082	0.50495
O2	0.94306	0.42784	0.49966	O2	0.94309	0.4268	0.50655
O3	0.42717	0.48523	0.48326	O3	0.42885	0.48519	0.51955
O4	0.57271	0.51485	0.49686	O4	0.57423	0.51567	0.50297
O5	0.515	0.94313	0.50004	O5	0.51431	0.94276	0.50427
O6	0.48504	0.057	0.49994	O6	0.48422	0.05676	0.50585
O7	0.57206	0.05699	0.49972	O7	0.57093	0.05656	0.50663
O8	0.42802	0.94322	0.49974	O8	0.42706	0.94202	0.50699
O9	0.48511	0.42717	0.49489	O9	0.48583	0.42763	0.49891
O10	0.51495	0.57297	0.48627	O10	0.51601	0.57261	0.52234
O11	0.94317	0.51486	0.50001	O11	0.94351	0.51387	0.50472
O12	0.05702	0.48493	0.50007	O12	0.05762	0.48393	0.50321
O13	0.51301	0.48478	0.68121	O13	0.48215	0.51253	0.70189
C1	0.38177	0.71567	0.50122	C1	0.38254	0.71505	0.49097
C2	0.61825	0.28449	0.4993	C2	0.61824	0.28435	0.4879
C3	0.28445	0.66661	0.50082	C3	0.28513	0.6656	0.49006
C4	0.71561	0.33351	0.50024	C4	0.71562	0.33304	0.49133
C5	0.33341	0.61826	0.50044	C5	0.33436	0.61751	0.4924
C6	0.66669	0.38194	0.49842	C6	0.66701	0.38168	0.48493
C7	0.7156	0.38182	0.49954	C7	0.71583	0.38148	0.48851

C8	0.28446	0.61833	0.50112	C8	0.28525	0.61738	0.48991
C9	0.66656	0.28446	0.5002	C9	0.66645	0.28411	0.4912
C10	0.33346	0.71564	0.50082	C10	0.3341	0.71474	0.49053
C11	0.61817	0.3334	0.49798	C11	0.61852	0.33338	0.48413
C12	0.38186	0.66672	0.50089	C12	0.3828	0.66613	0.49337
C13	0.19597	0.57381	0.50047	C13	0.1967	0.57264	0.49213
C14	0.80414	0.42631	0.50061	C14	0.80438	0.42563	0.49471
C15	0.42634	0.62275	0.49603	C15	0.42742	0.62227	0.50255
C16	0.57369	0.37744	0.4964	C16	0.57431	0.37773	0.48373
C17	0.37748	0.80417	0.50025	C17	0.37773	0.80325	0.4951
C18	0.62246	0.19595	0.50071	C18	0.62197	0.19558	0.4972
C19	0.57371	0.19599	0.50057	C19	0.57334	0.19579	0.49472
C20	0.42621	0.80416	0.50041	C20	0.42667	0.80365	0.49335
C21	0.62266	0.42645	0.49726	C21	0.62333	0.42658	0.4851
C22	0.37745	0.57385	0.49478	C22	0.37865	0.57331	0.50116
C23	0.80412	0.37754	0.50072	C23	0.80413	0.37676	0.49704
C24	0.19593	0.62251	0.50029	C24	0.19662	0.62134	0.494
C25	0.14908	0.5264	0.5003	C25	0.1497	0.52526	0.49434
C26	0.85115	0.47368	0.50076	C26	0.8515	0.47287	0.49736
C27	0.47347	0.62328	0.493	C27	0.47456	0.62293	0.50991
C28	0.52656	0.37685	0.49556	C28	0.52732	0.37767	0.48638
C29	0.37714	0.85115	0.50009	C29	0.37691	0.84993	0.50026
C30	0.62285	0.149	0.50037	C30	0.62207	0.14857	0.50203
C31	0.52633	0.14902	0.50073	C31	0.52581	0.14889	0.49782
C32	0.4736	0.85108	0.50027	C32	0.47377	0.85087	0.49556
C33	0.62317	0.47355	0.4975	C33	0.62385	0.4738	0.48949

C34	0.37688	0.52676	0.49005	C34	0.37825	0.52627	0.5069
C35	0.85104	0.37711	0.50038	C35	0.85093	0.37619	0.50163
C36	0.14891	0.6228	0.50011	C36	0.14972	0.62164	0.49877
C37	0.10301	0.52717	0.50014	C37	0.10368	0.52604	0.49959
C38	0.89712	0.47273	0.50041	C38	0.89738	0.47183	0.50218
C39	0.47281	0.57636	0.48914	C39	0.47382	0.57607	0.51565
C40	0.52722	0.42382	0.49604	C40	0.52813	0.42444	0.49463
C41	0.42408	0.89717	0.49995	C41	0.42355	0.8962	0.50304
C42	0.57591	0.10298	0.50017	C42	0.575	0.1026	0.50413
C43	0.52721	0.10301	0.50039	C43	0.52639	0.10276	0.50281
C44	0.47277	0.89713	0.50008	C44	0.47241	0.89658	0.50094
C45	0.57615	0.47278	0.49705	C45	0.57717	0.47331	0.49655
C46	0.42379	0.52737	0.48752	C46	0.4252	0.5273	0.51404
C47	0.89708	0.42401	0.50016	C47	0.89716	0.42303	0.50375
C48	0.1029	0.57583	0.50004	C48	0.10368	0.57472	0.50134
C49	0.49476	0.50138	0.62889	C49	0.5044	0.49392	0.65143
H1	0.14952	0.49022	0.50046	H1	0.15004	0.48901	0.49273
H2	0.8509	0.50998	0.50083	H2	0.85136	0.50921	0.4956
H3	0.50969	0.65983	0.49458	H3	0.51074	0.65955	0.51134
H4	0.49031	0.34034	0.4947	H4	0.49093	0.34128	0.48569
H5	0.34058	0.85089	0.49999	H5	0.34012	0.84913	0.50245
H6	0.6594	0.14931	0.50004	H6	0.65852	0.14868	0.50365
H7	0.49005	0.1493	0.50076	H7	0.4897	0.1495	0.49613
H8	0.5098	0.85071	0.50045	H8	0.51023	0.85095	0.49395
H9	0.65963	0.50984	0.49841	H9	0.66053	0.50996	0.49129
H10	0.34025	0.49057	0.48953	H10	0.34178	0.48994	0.50634

H11	0.85069	0.34054	0.50003	H11	0.85041	0.33951	0.50326
H12	0.14915	0.65935	0.50001	H12	0.15012	0.65826	0.50058
H13	0.47173	0.52012	0.64685	H13	0.48673	0.50739	0.76523
N1	0.24079	0.57317	0.50086	N1	0.24158	0.57214	0.48991
N2	0.75933	0.42694	0.5	N2	0.75976	0.42653	0.4901
N3	0.42691	0.66827	0.49977	N3	0.42782	0.66773	0.49804
N4	0.57315	0.33187	0.49668	N4	0.57353	0.33219	0.48246
N5	0.332	0.75933	0.50033	N5	0.33238	0.75827	0.49246
N6	0.66797	0.24079	0.5009	N6	0.6676	0.24032	0.49528
N7	0.57311	0.24079	0.49985	N7	0.57294	0.24067	0.48975
N8	0.4269	0.75937	0.50085	N8	0.42756	0.75895	0.49121
N9	0.66823	0.42697	0.49801	N9	0.66869	0.42694	0.48469
N10	0.3319	0.57324	0.49812	N10	0.33308	0.57261	0.49565
N11	0.75926	0.33205	0.50087	N11	0.75915	0.33138	0.49511
N12	0.24075	0.66803	0.50035	N12	0.24139	0.66691	0.49189
Rh1	0.49986	0.50001	0.49721	Rh1	0.50144	0.49986	0.52727
Rh2	0.50004	0.00009	0.49971	Rh2	0.499	- 0.00048	0.50746
Rh3	0.00002	0.49983	0.49976	Rh3	0.00047	0.49877	0.50637

Rh ₃ (HATNA) ₂				Rh ₃ (HATNA) ₂			
coordinates				coordinates			
*CHOH	x	y	z	*CH ₂ O	x	y	z
O1	0.05648	0.57180	0.50011	O1	0.05693	0.57204	0.50054
O2	0.94284	0.42758	0.50122	O2	0.94284	0.42811	0.50123
O3	0.4261	0.48478	0.48893	O3	0.42778	0.4852	0.47904
O4	0.57257	0.51564	0.49746	O4	0.5719	0.51521	0.48424

O5	0.51534	0.94336	0.49982	O5	0.51514	0.94331	0.50057
O6	0.48546	0.05723	0.50072	O6	0.48507	0.0573	0.50004
O7	0.57259	0.05733	0.50065	O7	0.57212	0.05738	0.50017
O8	0.42842	0.94364	0.49974	O8	0.42814	0.9433	0.4998
O9	0.48398	0.4269	0.49259	O9	0.48481	0.42813	0.48291
O10	0.51466	0.57315	0.49054	O10	0.51496	0.57231	0.47972
O11	0.9429	0.51473	0.50135	O11	0.943	0.5152	0.50113
O12	0.05682	0.48484	0.50037	O12	0.05692	0.48502	0.50089
O13	0.51749	0.48141	0.68168	O13	0.52269	0.48553	0.703
C1	0.38142	0.71592	0.49989	C1	0.38194	0.71565	0.5003
C2	0.61815	0.28465	0.4996	C2	0.61802	0.28489	0.50064
C3	0.28406	0.66701	0.50068	C3	0.28455	0.66657	0.50049
C4	0.71544	0.33366	0.49957	C4	0.71533	0.33392	0.50076
C5	0.33304	0.61875	0.49622	C5	0.33358	0.61828	0.49758
C6	0.66642	0.38192	0.4997	C6	0.66626	0.38225	0.50106
C7	0.71542	0.38197	0.49988	C7	0.71532	0.38225	0.50119
C8	0.28418	0.61877	0.49952	C8	0.28456	0.61825	0.49957
C9	0.66647	0.28468	0.49953	C9	0.66635	0.28492	0.50066
C10	0.33314	0.71605	0.50073	C10	0.33359	0.71563	0.5007
C11	0.61813	0.33359	0.49904	C11	0.61796	0.33389	0.50014
C12	0.38141	0.66703	0.49668	C12	0.38189	0.66659	0.49846
C13	0.19571	0.57402	0.50095	C13	0.19602	0.57374	0.50049
C14	0.80393	0.4263	0.50015	C14	0.80391	0.42665	0.5004
C15	0.42573	0.62298	0.49025	C15	0.42638	0.62255	0.49243
C16	0.57356	0.37753	0.49712	C16	0.57345	0.37795	0.49662
C17	0.37749	0.80461	0.50071	C17	0.37771	0.80419	0.50045

C18	0.62263	0.19623	0.49985	C18	0.62244	0.1964	0.50003
C19	0.57384	0.19617	0.50004	C19	0.57363	0.19636	0.50018
C20	0.42615	0.80444	0.50104	C20	0.42648	0.80422	0.50048
C21	0.62231	0.42631	0.49889	C21	0.62217	0.42677	0.49815
C22	0.3768	0.57415	0.48935	C22	0.37763	0.57383	0.49115
C23	0.8039	0.37753	0.49991	C23	0.80385	0.37785	0.50018
C24	0.19553	0.6227	0.50079	C24	0.19599	0.6225	0.50054
C25	0.14887	0.52655	0.50098	C25	0.14904	0.52638	0.5008
C26	0.85095	0.47355	0.50063	C26	0.85092	0.474	0.50045
C27	0.47281	0.62314	0.48903	C27	0.4737	0.62292	0.48892
C28	0.52633	0.37721	0.49517	C28	0.52608	0.37746	0.49259
C29	0.37732	0.85163	0.5002	C29	0.37736	0.85119	0.50023
C30	0.62319	0.14939	0.50003	C30	0.62284	0.14943	0.49998
C31	0.52659	0.14917	0.50029	C31	0.5263	0.14936	0.50017
C32	0.47365	0.85129	0.50091	C32	0.47384	0.85121	0.50051
C33	0.62248	0.47348	0.49952	C33	0.62244	0.47404	0.49545
C34	0.37639	0.52695	0.48723	C34	0.37719	0.52653	0.48673
C35	0.85075	0.37697	0.50026	C35	0.85079	0.37743	0.50039
C36	0.14849	0.62284	0.5004	C36	0.14897	0.62281	0.50041
C37	0.10274	0.52717	0.50058	C37	0.10296	0.52719	0.50093
C38	0.8969	0.47254	0.50109	C38	0.89694	0.47308	0.5009
C39	0.47199	0.57628	0.48925	C39	0.47278	0.57605	0.48392
C40	0.52694	0.42395	0.49493	C40	0.52686	0.42432	0.48872
C41	0.42441	0.89761	0.49998	C41	0.42427	0.89726	0.50015
C42	0.57635	0.10328	0.50044	C42	0.57595	0.10338	0.50008
C43	0.52762	0.10324	0.50049	C43	0.52722	0.10335	0.50012

C44	0.47302	0.89741	0.50023	C44	0.47298	0.89727	0.50049
C45	0.57566	0.47273	0.49747	C45	0.57554	0.47308	0.48965
C46	0.42314	0.52752	0.48838	C46	0.42404	0.52738	0.48304
C47	0.89688	0.42379	0.50098	C47	0.89685	0.42432	0.50089
C48	0.1025	0.57578	0.50029	C48	0.10295	0.57589	0.50067
C49	0.49674	0.49973	0.62706	C49	0.48859	0.49221	0.67268
H1	0.14947	0.49043	0.50095	H1	0.14939	0.49014	0.50064
H2	0.85082	0.5099	0.50058	H2	0.85059	0.51024	0.50045
H3	0.50916	0.65958	0.48938	H3	0.51003	0.65939	0.4899
H4	0.49014	0.34059	0.49293	H4	0.48986	0.34085	0.49168
H5	0.34087	0.85158	0.50021	H5	0.3408	0.85089	0.50013
H6	0.65988	0.14995	0.4998	H6	0.6594	0.1497	0.50001
H7	0.49026	0.14932	0.50019	H7	0.49002	0.14962	0.50035
H8	0.50982	0.85077	0.501	H8	0.51009	0.85088	0.50053
H9	0.65904	0.50974	0.50034	H9	0.65891	0.5104	0.49664
H10	0.33983	0.4907	0.48628	H10	0.34059	0.49034	0.4858
H11	0.8502	0.34028	0.49999	H11	0.85055	0.3409	0.50029
H12	0.14856	0.65929	0.50044	H12	0.14925	0.65938	0.50014
H13	0.4763	0.51632	0.66313	H13	0.49307	0.53152	0.66763
H14	0.53622	0.46678	0.6501	H14	0.45026	0.45942	0.65254
N1	0.24055	0.57354	0.50039	N1	0.24085	0.5731	0.4998
N2	0.75918	0.42709	0.50005	N2	0.7591	0.42735	0.50079
N3	0.42651	0.6685	0.49335	N3	0.42699	0.66796	0.49641
N4	0.57296	0.33206	0.49773	N4	0.57284	0.33248	0.49812
N5	0.33188	0.75982	0.50109	N5	0.33221	0.75937	0.5007
N6	0.66806	0.24108	0.49956	N6	0.66786	0.24126	0.5002

N7	0.57305	0.2409	0.49989	N7	0.57291	0.24114	0.50045
N8	0.42664	0.75959	0.50079	N8	0.4271	0.75936	0.50035
N9	0.66783	0.42704	0.50009	N9	0.66763	0.42737	0.50063
N10	0.33139	0.57359	0.49204	N10	0.33218	0.57318	0.49411
N11	0.75905	0.33212	0.4995	N11	0.75901	0.33242	0.50007
N12	0.24032	0.66831	0.50117	N12	0.24082	0.66799	0.50077
Rh1	0.49915	0.49997	0.50367	Rh1	0.49994	0.50025	0.47921
Rh2	0.50051	0.0004	0.50019	Rh2	0.50013	0.00032	0.50007
Rh3	- 0.00024	0.49968	0.50079	Rh3	- 0.00008	0.50008	0.50099
Rh ₃ (HATNA) ₂ coordinates				Rh ₃ (HATNA) ₂ coordinates			
*CH ₂ OH	x	y	z	*+CH ₃ OH	x	y	z
O1	0.05648	0.57192	0.50139	O1	0.05673	0.57259	0.50289
O2	0.94276	0.42782	0.50135	O2	0.94226	0.42864	0.50218
O3	0.42607	0.48482	0.48755	O3	0.42682	0.48459	0.46706
O4	0.57144	0.51439	0.49736	O4	0.57065	0.51462	0.47484
O5	0.51522	0.94328	0.50125	O5	0.51506	0.94312	0.50236
O6	0.48531	0.05713	0.50087	O6	0.48485	0.05709	0.50261
O7	0.5724	0.0572	0.50104	O7	0.57201	0.05748	0.50224
O8	0.42833	0.94359	0.50064	O8	0.42807	0.94306	0.50254
O9	0.48424	0.42678	0.48748	O9	0.48396	0.42749	0.46952
O10	0.51348	0.57198	0.49299	O10	0.51394	0.57139	0.47135
O11	0.94284	0.51493	0.50159	O11	0.94241	0.51565	0.50223
O12	0.05671	0.48498	0.50174	O12	0.0564	0.4855	0.50332
O13	0.51228	0.46817	0.67489	O13	0.52303	0.46924	0.67865

C1	0.3814	0.7159	0.49801	C1	0.38177	0.71533	0.49941
C2	0.61805	0.28456	0.49914	C2	0.61733	0.28487	0.5002
C3	0.28405	0.66699	0.4993	C3	0.28436	0.66643	0.49984
C4	0.71533	0.33369	0.49949	C4	0.71462	0.33417	0.50067
C5	0.3329	0.61859	0.49525	C5	0.33318	0.61797	0.49643
C6	0.6663	0.38201	0.49937	C6	0.66543	0.38227	0.50069
C7	0.71529	0.38199	0.49957	C7	0.71455	0.38245	0.50129
C8	0.28407	0.61873	0.4979	C8	0.28422	0.61804	0.49904
C9	0.66638	0.28465	0.49941	C9	0.6657	0.28507	0.50038
C10	0.33315	0.716	0.49927	C10	0.33348	0.71541	0.49989
C11	0.61788	0.33346	0.49863	C11	0.6172	0.33384	0.49916
C12	0.38139	0.66695	0.4955	C12	0.38158	0.66619	0.49729
C13	0.19561	0.57404	0.5005	C13	0.19562	0.57371	0.50075
C14	0.80383	0.42639	0.50023	C14	0.80315	0.42708	0.50099
C15	0.42561	0.62272	0.49102	C15	0.42578	0.62195	0.48974
C16	0.5731	0.37723	0.49649	C16	0.57247	0.37766	0.49294
C17	0.37746	0.80455	0.50047	C17	0.37768	0.80398	0.50046
C18	0.62257	0.19617	0.5	C18	0.62191	0.19653	0.50023
C19	0.57375	0.19608	0.49993	C19	0.57306	0.19632	0.50046
C20	0.42615	0.80438	0.5003	C20	0.42642	0.80393	0.50029
C21	0.62193	0.4262	0.49868	C21	0.62108	0.42651	0.49596
C22	0.37661	0.57389	0.49023	C22	0.37697	0.57333	0.48795
C23	0.80382	0.37761	0.5001	C23	0.80316	0.37835	0.50054
C24	0.19551	0.62274	0.50075	C24	0.19578	0.62255	0.5007
C25	0.14877	0.52657	0.50126	C25	0.14849	0.52648	0.50171
C26	0.85084	0.47369	0.50074	C26	0.85024	0.47441	0.50122

C27	0.4726	0.62292	0.49067	C27	0.47297	0.62214	0.48498
C28	0.52588	0.37653	0.49326	C28	0.52515	0.37707	0.48561
C29	0.37729	0.85159	0.5006	C29	0.37732	0.85096	0.50101
C30	0.62304	0.14926	0.50029	C30	0.62249	0.14965	0.50044
C31	0.52647	0.14907	0.50031	C31	0.52582	0.14918	0.50102
C32	0.47362	0.85125	0.50097	C32	0.47376	0.85097	0.50072
C33	0.62214	0.47322	0.49939	C33	0.62122	0.47373	0.49224
C34	0.37583	0.5266	0.48796	C34	0.3764	0.52599	0.48094
C35	0.85073	0.37717	0.50039	C35	0.85011	0.37795	0.50055
C36	0.14847	0.62291	0.50108	C36	0.14889	0.62313	0.50129
C37	0.10267	0.52726	0.50164	C37	0.10253	0.52756	0.50256
C38	0.89679	0.47275	0.50125	C38	0.8963	0.47355	0.5017
C39	0.47157	0.57581	0.49066	C39	0.47188	0.57532	0.47692
C40	0.52626	0.42336	0.49241	C40	0.52586	0.42384	0.47958
C41	0.42432	0.89753	0.50083	C41	0.42421	0.89703	0.50181
C42	0.5762	0.10319	0.50071	C42	0.57571	0.10345	0.50152
C43	0.52747	0.10315	0.50069	C43	0.52689	0.10323	0.50179
C44	0.47292	0.89733	0.50115	C44	0.47292	0.89705	0.50169
C45	0.57511	0.4723	0.49676	C45	0.57443	0.47265	0.48286
C46	0.42262	0.52701	0.48838	C46	0.42313	0.52673	0.47466
C47	0.89678	0.42404	0.50109	C47	0.89623	0.42482	0.50152
C48	0.10253	0.57589	0.50145	C48	0.10271	0.57635	0.50233
C49	0.49808	0.50089	0.63601	C49	0.50007	0.50061	0.69492
H1	0.14931	0.49043	0.50101	H1	0.1486	0.49011	0.50149
H2	0.85061	0.50999	0.50077	H2	0.85	0.51072	0.50133
H3	0.50895	0.6594	0.4915	H3	0.5093	0.65859	0.48659

H4	0.48972	0.33988	0.49173	H4	0.4891	0.34034	0.48327
H5	0.3408	0.85145	0.50039	H5	0.34066	0.85048	0.50093
H6	0.65967	0.14967	0.5001	H6	0.65926	0.15037	0.49999
H7	0.49017	0.14932	0.50023	H7	0.48946	0.14933	0.50098
H8	0.5098	0.85078	0.50087	H8	0.51005	0.85069	0.50042
H9	0.65861	0.50957	0.50116	H9	0.65773	0.51003	0.49436
H10	0.3391	0.49051	0.48741	H10	0.33971	0.48987	0.47984
H11	0.85033	0.34055	0.50006	H11	0.84953	0.34124	0.49996
H12	0.1486	0.65939	0.50082	H12	0.14953	0.65986	0.50092
H13	0.4576	0.48749	0.65185	H13	0.46054	0.47906	0.66902
H14	0.54977	0.48447	0.67469	H14	0.55639	0.48503	0.70812
H15	0.52445	0.54208	0.64921	H15	0.52054	0.53795	0.65952
N1	0.24043	0.57352	0.4989	H16	0.49826	0.50785	0.76662
N2	0.75905	0.4271	0.49989	N1	0.24041	0.57295	0.49966
N3	0.42638	0.66835	0.4934	N2	0.75827	0.42766	0.50123
N4	0.57278	0.3318	0.49751	N3	0.42661	0.66744	0.49484
N5	0.33189	0.75978	0.50036	N4	0.57203	0.33229	0.49571
N6	0.66798	0.24106	0.49977	N5	0.33216	0.75918	0.50024
N7	0.57297	0.24081	0.49937	N6	0.66729	0.24145	0.50007
N8	0.42661	0.75951	0.49895	N7	0.57225	0.24107	0.50018
N9	0.66758	0.42696	0.50007	N8	0.42695	0.75902	0.49964
N10	0.33116	0.57347	0.49247	N9	0.66661	0.42732	0.50029
N11	0.75896	0.33218	0.49974	N10	0.33161	0.5728	0.4922
N12	0.24031	0.66833	0.50054	N11	0.75837	0.33284	0.50019
Rh1	0.49846	0.49915	0.49639	N12	0.2407	0.66796	0.50033
Rh2	0.50037	0.0003	0.50101	Rh1	0.49885	0.49941	0.46576

Rh3	0.9997	0.49987	0.50163	Rh2	0.50005	0.0002	0.50287
				Rh3	0.99945	0.50061	0.50304
Rh ₃ (HATNA) ₂				Rh ₃ (HATNA) ₂			
	coordinates				coordinates		
*CH	x	y	z	*H	x	y	z
O1	0.0565	0.5718	0.50051	O1	0.05696	0.57197	0.50003
O2	0.94278	0.42775	0.50113	O2	0.94303	0.42803	0.50003
O3	0.42734	0.48459	0.48793	O3	0.42742	0.48515	0.49542
O4	0.57223	0.51584	0.49394	O4	0.57258	0.51483	0.49522
O5	0.51521	0.94328	0.50034	O5	0.51505	0.9431	0.50003
O6	0.48546	0.05725	0.50069	O6	0.48495	0.0569	0.50003
O7	0.57242	0.05735	0.50065	O7	0.57197	0.05697	0.50003
O8	0.42839	0.94361	0.49988	O8	0.42803	0.94303	0.50002
O9	0.48391	0.42745	0.48948	O9	0.48517	0.4274	0.49514
O10	0.51502	0.57212	0.48991	O10	0.51484	0.57257	0.49553
O11	0.94284	0.51468	0.50132	O11	0.9431	0.51505	0.50003
O12	0.05683	0.48499	0.50094	O12	0.05689	0.48495	0.50003
C1	0.38165	0.71571	0.49891	C1	0.38186	0.71552	0.49996
C2	0.618	0.28483	0.49934	C2	0.61814	0.28448	0.49996
C3	0.2843	0.66677	0.50006	C3	0.28451	0.66645	0.49995
C4	0.71528	0.33376	0.49964	C4	0.71549	0.33355	0.49995
C5	0.33333	0.61831	0.49561	C5	0.33341	0.61807	0.50016
C6	0.66623	0.38208	0.49964	C6	0.66659	0.38192	0.50016
C7	0.71524	0.3821	0.49983	C7	0.71552	0.38185	0.49995
C8	0.28434	0.61847	0.49861	C8	0.28448	0.61814	0.49996

C9	0.66635	0.28481	0.49955	C9	0.66645	0.28451	0.49995
C10	0.33337	0.71581	0.50011	C10	0.33355	0.71548	0.49996
C11	0.61797	0.33379	0.49881	C11	0.61808	0.33341	0.50017
C12	0.38176	0.66669	0.49603	C12	0.38193	0.66659	0.50016
C13	0.19577	0.57399	0.50071	C13	0.19597	0.57363	0.50001
C14	0.8038	0.42632	0.50024	C14	0.80403	0.42637	0.50002
C15	0.42618	0.6225	0.49055	C15	0.42642	0.62256	0.50024
C16	0.57329	0.37777	0.49698	C16	0.57358	0.37744	0.50026
C17	0.37749	0.80443	0.50076	C17	0.37761	0.80402	0.50004
C18	0.62258	0.19633	0.49998	C18	0.62239	0.19598	0.50004
C19	0.57379	0.19629	0.50001	C19	0.57363	0.19597	0.50001
C20	0.42617	0.8043	0.50074	C20	0.42637	0.80403	0.50002
C21	0.62209	0.42661	0.49871	C21	0.62256	0.42642	0.50026
C22	0.37735	0.57375	0.48971	C22	0.37744	0.57358	0.50025
C23	0.80377	0.37754	0.50007	C23	0.80402	0.37761	0.50004
C24	0.19567	0.62269	0.50085	C24	0.19598	0.62239	0.50004
C25	0.14889	0.52658	0.50114	C25	0.14898	0.52625	0.50003
C26	0.85085	0.47359	0.50069	C26	0.85101	0.47375	0.50003
C27	0.47338	0.62271	0.48924	C27	0.47357	0.6231	0.49939
C28	0.52605	0.37759	0.49397	C28	0.52644	0.37689	0.49936
C29	0.37729	0.85152	0.50043	C29	0.37724	0.85098	0.50002
C30	0.62313	0.14944	0.50012	C30	0.62276	0.14902	0.50002
C31	0.52653	0.14923	0.50032	C31	0.52625	0.14898	0.50003
C32	0.47359	0.85119	0.50099	C32	0.47374	0.85102	0.50003
C33	0.62217	0.47381	0.49786	C33	0.62311	0.47356	0.49937
C34	0.37692	0.52645	0.48723	C34	0.3769	0.52644	0.49938

C35	0.85066	0.377	0.50033	C35	0.85098	0.37724	0.50002
C36	0.14859	0.62291	0.50067	C36	0.14902	0.62275	0.50002
C37	0.10278	0.52728	0.50109	C37	0.10295	0.5271	0.50004
C38	0.89679	0.47258	0.50109	C38	0.89705	0.47289	0.50003
C39	0.47244	0.57575	0.48954	C39	0.47279	0.57611	0.49758
C40	0.52673	0.42432	0.4939	C40	0.52723	0.42388	0.49742
C41	0.4243	0.89749	0.5003	C41	0.42418	0.89703	0.50002
C42	0.57628	0.10334	0.50049	C42	0.57582	0.10297	0.50002
C43	0.52755	0.1033	0.50058	C43	0.5271	0.10295	0.50003
C44	0.47292	0.89731	0.50065	C44	0.47289	0.89705	0.50003
C45	0.57536	0.47301	0.4961	C45	0.57612	0.47277	0.49745
C46	0.42382	0.5272	0.48846	C46	0.42389	0.52721	0.49755
C47	0.89678	0.42387	0.50093	C47	0.89703	0.42418	0.50002
C48	0.10262	0.57589	0.50078	C48	0.10297	0.57582	0.50002
C49	0.49576	0.50063	0.62969	H1	0.14931	0.48999	0.50003
H1	0.14934	0.4904	0.501	H2	0.85069	0.51	0.50003
H2	0.85067	0.5099	0.50072	H3	0.50986	0.65966	0.49993
H3	0.5096	0.65931	0.4899	H4	0.49014	0.34032	0.49991
H4	0.48981	0.34101	0.4928	H5	0.34068	0.85067	0.50002
H5	0.34085	0.85149	0.50014	H6	0.65932	0.14933	0.50002
H6	0.65974	0.14982	0.49993	H7	0.49	0.14931	0.50002
H7	0.49021	0.14942	0.5003	H8	0.51	0.85069	0.50002
H8	0.50977	0.85072	0.50099	H9	0.65968	0.50986	0.49992
H9	0.65865	0.51011	0.49988	H10	0.34034	0.49014	0.49992
H10	0.34023	0.49033	0.48664	H11	0.85067	0.34068	0.50002
H11	0.85029	0.3404	0.50005	H12	0.14933	0.65932	0.50002

H12	0.14863	0.65935	0.50039	H13	0.49994	0.49973	0.60033
H13	0.47516	0.5177	0.66604	N1	0.24077	0.57298	0.49997
N1	0.24061	0.57338	0.49947	N2	0.75923	0.42702	0.49997
N2	0.75908	0.42716	0.50003	N3	0.42696	0.66811	0.5007
N3	0.4268	0.66806	0.49361	N4	0.57305	0.33189	0.50073
N4	0.57275	0.33237	0.49784	N5	0.33212	0.75917	0.50004
N5	0.33199	0.75956	0.50095	N6	0.66788	0.24083	0.50004
N6	0.66796	0.24121	0.49979	N7	0.57298	0.24077	0.49996
N7	0.57294	0.24098	0.49961	N8	0.42702	0.75923	0.49997
N8	0.42675	0.75944	0.49978	N9	0.66811	0.42695	0.50073
N9	0.66753	0.42724	0.5004	N10	0.33189	0.57304	0.50071
N10	0.33184	0.57324	0.49239	N11	0.75917	0.33212	0.50004
N11	0.75889	0.33216	0.4997	N12	0.24083	0.66788	0.50004
N12	0.24056	0.66817	0.50102	Rh1	0.5	0.49997	0.49834
Rh1	0.49922	0.49994	0.5115	Rh2	0.5	0	0.50003
Rh2	0.50046	0.00037	0.50031	Rh3	0	0.5	0.50003
Rh3	0.99973	0.49972	0.50098				

Table S2. The frequency of the adsorbent($G_{(T)}$) and the change in free energy at each

step in CO₂RR ($\Delta G/\text{eV}$).

Catalysts	*OCHO		*COOH	
	G _(T)	ΔG	G(T)	ΔG
Cr ₃ (HATNA) ₂	0.51	0.39	0.48	0.87
Mn ₃ (HATNA) ₂	0.48	1.09	0.51	1.11
Fe ₃ (HATNA) ₂	0.48	1.27	0.54	1.16
Co ₃ (HATNA) ₂	0.50	1.49	0.51	0.95
Ni ₃ (HATNA) ₂	0.47	1.97	0.51	1.44
Cu ₃ (HATNA) ₂	0.45	2.10	0.47	1.82
Ru ₃ (HATNA) ₂	0.55	0.96	0.54	0.56
Rh ₃ (HATNA) ₂	0.51	1.12	0.54	0.33
Pd ₃ (HATNA) ₂	0.46	2.18	0.51	1.33
Ag ₃ (HATNA) ₂	0.47	2.20	0.53	1.81

Table S3. The frequency of the adsorbent($G_{(T)}$) and the change in free energy at each step in CO₂RR ($\Delta G/\text{eV}$).

$\text{Cr}_3(\text{HATNA})_2$	$G_{(T)}$	ΔG
*OCHO	0.51	0.39
*COOH	0.48	0.87
*HCOOH	0.86	-0.27
*OCH ₂ O	0.63	0.90
*H ₂ COOH	1.12	0.23
*CHO	0.35	0.49
*OCH ₂	0.69	-0.12
*OCH ₃	0.97	-1.00
*CH ₂ OH	1.04	0.01
*+CH ₃ OH		1.16
*O	0.06	0.29
*OH	0.32	0.03
*+H ₂ O		0.54

Table S4. The frequency of the adsorbent($G_{(T)}$) and the change in free energy at each step in CO₂RR ($\Delta G/\text{eV}$).

Adsorption intermediate	Ru ₃ (HATNA) ₂		Rh ₃ (HATNA) ₂	
	$G_{(T)}$	ΔG	$G_{(T)}$	ΔG
*COOH	0.54	0.56	0.54	0.33
*OCHO	0.55	0.97	0.51	1.11
*CO	0.15	-0.97	0.16	-0.54
*HCOOH	0.79	-0.56	0.82	0.15
*CHO	0.38	0.53	0.39	0.03
*COH	0.38	1.44	0.38	1.84
*CHOH	0.74	-0.01	0.72	0.36
*CH ₂ O	0.58	0.78	0.61	1.74
*CH ₂ OH	1.03	-0.06	1.03	-0.43
*CH	0.32	0.81	0.27	1.96
*+CH ₃ OH		-0.23		0.35

Table S5. The frequency of the adsorbent($G_{(T)}$) and the change in free energy at each step in CO₂RR ($\Delta G/\text{eV}$).

Catalysts	[*] H	
	$G(T)$	ΔG
Cr ₃ (HATNA) ₂	0.19	0.39
Ru ₃ (HATNA) ₂	0.20	-0.03
Rh ₃ (HATNA) ₂	0.20	-0.24