

# Supporting Information

## Mechanistic Explanation of the pH Dependence and Onset Potentials for Hydrocarbon Products from Electrochemical Reduction of CO on Cu(111)

Hai Xiao, Tao Cheng, William A. Goddard III\*, and Ravishankar Sundararaman

Materials and Process Simulation Center(MSC) and Joint Center for Artificial Photosynthesis (JCAP),  
California Institute of Technology, Pasadena, CA 91125, United States

### Corresponding Author

\* wag@wag.caltech.edu

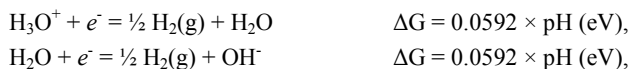
### QUANTUM MECHANICS COMPUTATIONAL DETAILS

The calculations were first performed with VASP package<sup>1-3</sup>, using the PBE flavor<sup>4</sup> of density functional theory (DFT) and the projector augmented wave (PAW) method<sup>5</sup> to account for core-valence interactions. The kinetic energy cutoff for plane wave expansions was set to 400 eV, and reciprocal space was sampled by  $\Gamma$ -centered Monkhorst-Pack scheme with a grid of  $3 \times 3 \times 1$ . The Cu surface slabs were constructed using the PBE-optimized lattice parameter of 3.635 Å, with vacuum layers of at least 15 Å, and explicit water molecules were added where they have direct chemical interactions with reactant adsorbates, e.g., hydrogen bonding and shuttling surface hydrogen<sup>6</sup>. The details of surface slab dimensions and numbers of explicit water molecules are listed in Table S1.

The convergence criteria are  $1 \times 10^{-5}$  and  $1 \times 10^{-7}$  eV energy differences for solving for the electronic wavefunction for local minima (initial states (IS) and final states (FS)) and transition states (TS), respectively. The Methfessel-Paxton smearing of second order with a width of 0.1 eV was applied. All IS, TS, and FS geometries (atomic coordinates) are converged to within  $3 \times 10^{-2}$  eV/Å for maximal components of forces. The TS search was conducted with using climbing image nudged elastic band (CI-NEB) method<sup>7</sup> to locate initial guess geometries, followed by the dimer method<sup>8</sup> to converge to the saddle points.

Zero-point energies (ZPE), enthalpy and entropy contributions to free energies at room temperature (298.15 K) were calculated from vibrational modes of surface species, which were computed with density functional perturbation theory (DFPT). Note that very low frequency modes were obtained in some cases, because the explicit water molecules are not properly constrained by the hydrogen bonding network present in water bulk. Such low frequency modes can cause unphysically large entropy contributions, so they were reset to a threshold value of  $60 \text{ cm}^{-1}$ , corresponding to the acoustic translational mode of the six-member rings in water bulk.<sup>9,10</sup>

For protonation steps, the surface hydrogen model was used to locate TS's, and IS's were referenced back to with the  $\text{H}^+(\text{H}_3\text{O}^+/\text{H}_2\text{O}) + e^-$  pair through free energy differences between surface hydrogen and  $\text{H}_2(\text{g})$ , based on the half-cell reactions,



Thus the pH effect is naturally introduced here. In addition to vibrational contributions, the translational and rotational contributions to the free energy of  $\text{H}_2(\text{g})$  were included, assuming the ideal gas model.

The explicit constant electrochemical potential ( $\mu_e$ ) calculations using the implicit CANDLE solvation model<sup>11</sup> were performed upon all IS, TS, and FS geometries using JDFTx<sup>12</sup>. The GBRV<sup>13</sup> ultrasoft pseudopotentials (USPP) were used, with a plane wave cutoff of 544 eV (20 a.u.). All other settings are similar to those in VASP calculations. The ionic screening of net charges resulting from the constant  $\mu_e$  condition was achieved with cation (0.1 M  $\text{K}^+$ ) and anion (0.1 M  $\text{F}^-$ ) components in the fluid model<sup>14</sup> under the framework of joint density functional theory (JDFT)<sup>15</sup>. The algorithm employed by JDFTx<sup>12</sup> variationally minimizes the grand free energy at fixed electron chemical potential with respect to Kohn-Sham orbitals,<sup>16</sup> fluid bound charge and an auxiliary Hamiltonian for the occupations.<sup>17</sup> We found that the relative free energies (barriers  $\Delta G^\ddagger$  and reaction energies  $\Delta G$ ) are linearly dependent on the applied potential  $U$  for  $|U| < \sim 2$  V (vs standard hydrogen electrode (SHE)), as illustrated with the  $\Delta G^\ddagger$  and  $\Delta G$  of COH path in Figure S1. Consequently the  $U$ -dependence of all  $\Delta G^\ddagger$  and  $\Delta G$  was calculated assuming this linear relationship.

Table S1. Surface slab dimensions and numbers of explicit water molecules  $N(\text{H}_2\text{O})$  included in IS for each step.

Reaction	Slab dimensions	$N(\text{H}_2\text{O})$ in IS
$\text{CO} + \text{H} = \text{COH}$	$3 \times 3$ (4L)	1
$\text{CO} + \text{H} = \text{CHO}$	$3 \times 3$ (4L)	1
$\text{CO} + \text{CO} = \text{OC-CO}$	$4 \times 4$ (3L)	2
$\text{COH} + \text{H} = \text{CHOH}$	$3 \times 3$ (4L)	1
$\text{COH} + \text{CO} = \text{OC-COH}$	$4 \times 4$ (3L)	2
$\text{OC-CO} + \text{H} = \text{OC-COH}$	$4 \times 5$ (3L)	2
$\text{CHO} + \text{H} = \text{CHOH}$	$3 \times 3$ (4L)	1
$\text{COH} + \text{H} = \text{C} + \text{H}_2\text{O}$	$3 \times 4$ (4L)	2

Note that the top 2 layers are allowed to relax, with the bottom 1 or 2 layers fixed.

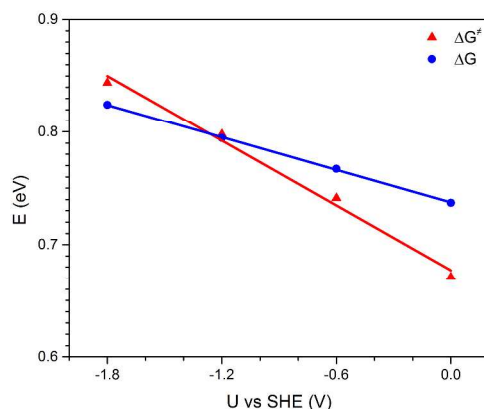


Figure S1. Linear  $U$ -dependence of  $\Delta G^\ddagger$  and  $\Delta G$  of COH step.

## FREE ENERGY PROFILES

Table S2. Free energy profiles of all pathways for the first two steps.  $\Delta G^\ddagger$  is the transition state free energy relative to the reactants and  $\Delta G$  is the overall free energy changes from reactants to products.

Reaction	$\Delta G^\ddagger$ (eV)	$\Delta G$ (eV)
$\text{CO} + \text{H} = \text{COH}$	$0.63 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.0959 \times U$	$0.70 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.0482 \times U$
$\text{CO} + \text{H} = \text{CHO}$	$0.84 + 0.0592 \times \text{pH} + 0.0242 \times U$	$0.76 + 0.0592 \times \text{pH} + 0.0352 \times U$
$\text{CO} + \text{CO} = \text{OC-CO}$	$1.15 + 0.0510 \times U$	$1.20 + 0.2852 \times U$
$\text{COH} + \text{H} = \text{CHOH}$	$0.49 + 0.0592 \times \text{pH} + 0.0151 \times U$	$0.03 + 0.0592 \times \text{pH} + 0.0489 \times U$
$\text{COH} + \text{CO} = \text{OC-COH}$	$0.87 + 0.0504 \times U$	$0.16 + 0.1775 \times U$
$\text{OC-CO} + \text{H} = \text{OC-COH}$	$0.55 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.0645 \times U$	$-0.13 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.0186 \times U$
$\text{CHO} + \text{H} = \text{CHOH}$	$0.45 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.0511 \times U$	$0.00 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.0337 \times U$
$\text{COH} + \text{H} = \text{C} + \text{H}_2\text{O}$	$0.90 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.1773 \times U$	$0.85 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.1879 \times U$

## RADICAL CHARACTER OF $\text{COH}_{\text{ad}}$

The COH adsorbate forms three bonds to surface Cu atoms on a *fcc* site of Cu(111), leading to weak C-Cu bonds, making it relatively easy for  $\text{COH}_{\text{ad}}$  to acquire radical character. Thus although the PBE wavefunction gives a closed shell ground state, enforcing a total  $M_S = 1/2$  (doublet state) to provide an unpaired radical electron increases the energy by only 0.03 eV, indicating that forming a covalent bond to the C should be quite favorable. Figure S2 shows the electron density difference between the doublet and closed shell ground states. The unpaired spin of the doublet state is mostly localized on the C atom of  $\text{COH}_{\text{ad}}$ .

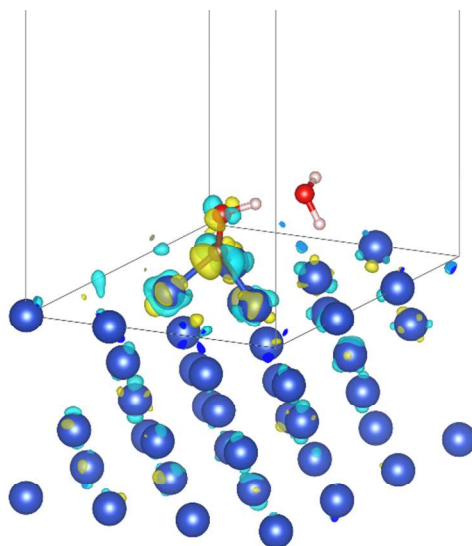


Figure S2. The electron density difference between the doublet ( $M_S = 1/2$ ) and closed shell ground states ( $M_S = 0$ ) of  $\text{COH}_{\text{ad}}$  on  $\text{Cu}(111)$ . Cyan colored contour stands for holes, and yellow for extra electrons.

### BRANCH TO $\text{C}_3$ PATHWAY

After forming the OCCOH adsorbate, there is a pathway for coupling to a  $3^{\text{rd}}$   $\text{CO}_{\text{ad}}$  to form new  $\text{C}_3$  intermediates (R1c-iii). This is in addition to advancing the  $\text{C}_2$  pathway through either further protonation to the HOCCOH adsorbate (R1c-i) or removal of the OH group to form the OCC adsorbate (R1c-ii), as shown in Figure S3. Using the slab models described in Table S3, we calculated the free energy profiles of these pathways as listed in Table S4. For the case of  $\text{pH} = 7$  (Figure S4), we predict that  $\text{C}_3$  pathway has a kinetic rate ratio of 0.02:1 to the  $\text{C}_2$  pathway (R1c-i), making minor  $\text{C}_3$  products, in agreement with experiments which find 1 to 4%  $\text{C}_3$  products.<sup>18</sup>

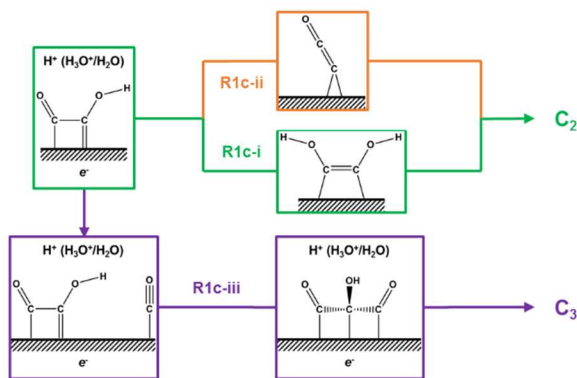


Figure S3. Pathways for the step following  $\text{OCCOH}_{\text{ad}}$  formation.

Table S3. Surface slab dimensions and  $\text{N}(\text{H}_2\text{O})$  included in IS for each step.

Reaction	Slab dimensions	$\text{N}(\text{H}_2\text{O})$ in IS
$\text{OCCOH} + \text{H} = \text{HOCCOH}$	$4 \times 5$ (3L)	2
$\text{OCCOH} + \text{H} = \text{OCC} + \text{H}_2\text{O}$	$4 \times 5$ (3L)	3
$\text{OCCOH} + \text{CO} = \text{OCCOHCO}$	$5 \times 5$ (3L)	3

Table S4. Free energy profiles of pathways for the step following  $\text{OCCOH}_{\text{ad}}$  formation.

Reaction	$\Delta G^\ddagger$ (eV)	$\Delta G$ (eV)
$\text{OCCOH} + \text{H} = \text{HOCCOH}$	$0.47 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.1155 \times U$	$-0.32 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.1686 \times U$
$\text{OCCOH} + \text{H} = \text{OCC} + \text{H}_2\text{O}$	$0.60 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.1512 \times U$	$0.28 + 0.0592 \times \text{pH} - 0.2420 \times U$
$\text{OCCOH} + \text{CO} = \text{OCCOHCO}$	$1.03 + 0.0257 \times U$	$-0.20 - 0.2618 \times U$

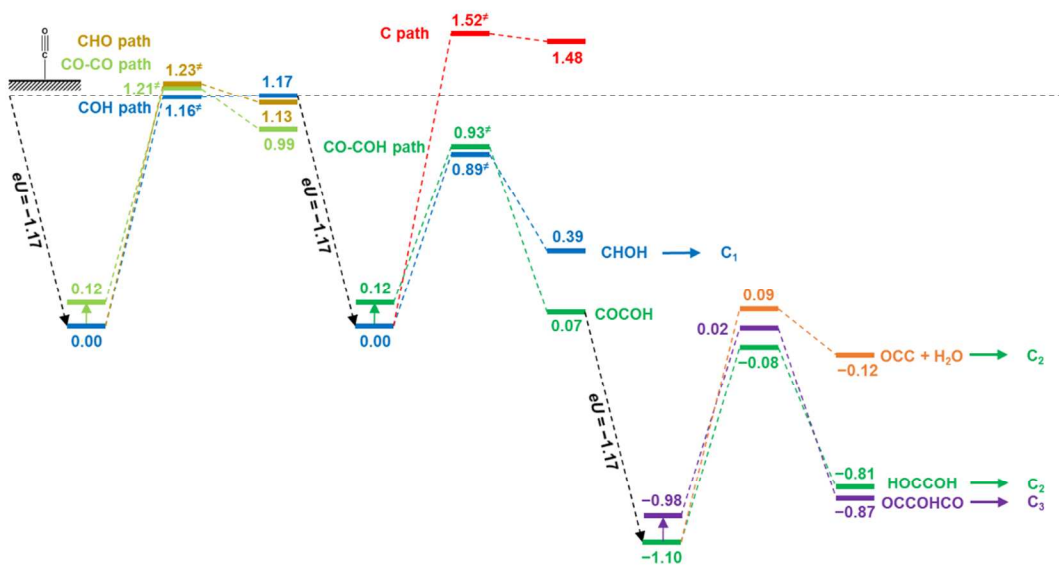


Figure S4. COER free energy profiles at pH = 7, with the C<sub>3</sub> branch included. Here the dominant pathway is provided by the green line leading to C<sub>2</sub> products, but the blue pathway to C<sub>3</sub> leads to 2% C<sub>3</sub> at 298 K in agreement with the 1% to 4% observed experimentally.

### COORDINATES FOR ALL STRUCTURES

CO + H = COH

IS

```

7.7109994488393001  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-3.8554997244196501  6.6779214112626404  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  21.2960046855129015

```

Cu C O H

36 1 2 3

Selective dynamics

Direct

```

0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.7043574708735889  F F F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.7043574708735889  F F F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.7043574708735889  F F F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.7043574708735889  F F F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.7043574708735889  F F F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.7043574708735889  F F F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.7043574708735889  F F F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.7043574708735889  F F F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.7043574708735889  F F F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.8029049805823973  F F F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.8029049805823973  F F F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.8029049805823973  F F F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.8029049805823973  F F F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.8029049805823973  F F F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.8029049805823973  F F F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.8029049805823973  F F F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.8029049805823973  F F F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.8029049805823973  F F F

```

0.2226233843634067	0.1125483236599276	0.9005608663043201	T	T	T
0.5560625788492658	0.1116828629763345	0.9012359608268978	T	T	T
0.8885788048609797	0.1104733983732594	0.9003782386230581	T	T	T
0.2250471844790845	0.4430485543628788	0.9013627479892204	T	T	T
0.5558177205905427	0.4441597522205858	0.9022865870313144	T	T	T
0.8839484277068224	0.4414218433034090	0.9020381003835664	T	T	T
0.2247091187030213	0.7777779945045583	0.9021694937967306	T	T	T
0.5540647231362728	0.7766013944893789	0.9003254293281254	T	T	T
0.8872791930607994	0.7763939226300159	0.9012533933147556	T	T	T
0.9989218288746328	0.9997630249821994	0.9975836014172270	T	T	T
0.3300965420499677	0.9956213629589512	0.9993345453942528	T	T	T
0.6691157112358148	0.0020339988378879	0.9970356809551416	T	T	T
0.9986699651807248	0.3307736818481408	0.9967924572608672	T	T	T
0.3317776830104032	0.3317490620243087	0.0049010337867691	T	T	T
0.6696084203290376	0.3320216415829095	0.0055716962673191	T	T	T
0.9993048722297536	0.6666575220883554	0.9975307378273304	T	T	T
0.3306141695538989	0.6647564706833540	0.0018042927572554	T	T	T
0.6702332977312453	0.6720528272818787	0.0003244991272448	T	T	T
0.4536743956560939	0.5792510111635715	0.0677805340841241	T	T	T
0.4661102722679371	0.5744688090323493	0.1233944940420260	T	T	T
0.7472601443274816	0.3844663662860079	0.1241849868613152	T	T	T
0.6793258200451514	0.4543441007336593	0.1397539958136917	T	T	T
0.8898238485115030	0.4789245727434888	0.1296948306534990	T	T	T
0.4313542440569804	0.2045810506002262	0.0429434921390892	T	T	T

TS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
36 1 2 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
-0.0000000000000004	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777793	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777793	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.1111111111111142	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444428	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F

0.7777777777777786	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.2233529665425962	0.1117384649409745	0.9014608623381251	T	T	T
0.5556295805944615	0.1096028616953291	0.9000784515781539	T	T	T
0.8888015929272408	0.1104212212198624	0.9011387636986188	T	T	T
0.2238322732732333	0.4447623378886033	0.9015202334719148	T	T	T
0.5554209843153938	0.4446352434749912	0.9008452324286823	T	T	T
0.8885328313245140	0.4436569518046399	0.9009660220741850	T	T	T
0.2248792950297509	0.7767708250197555	0.9029793020576461	T	T	T
0.5548826263507656	0.7767766733017880	0.9014755730892011	T	T	T
0.8874067231142039	0.7761201543791120	0.9019700426187873	T	T	T
0.0002480779373885	0.9995504671432357	0.9986786403307799	T	T	T
0.3365672479910386	0.0024591126506191	0.0006127889019187	T	T	T
0.6682603662437402	0.0029677147214574	0.9986269152171239	T	T	T
0.9974926016662352	0.3319824980868339	0.9983024701957408	T	T	T
0.3320857027985857	0.3292785412085719	0.0016433450512477	T	T	T
0.6653047775294041	0.3291181862628198	0.9978907974023232	T	T	T
-0.0000878519329937	0.6659597687965061	0.9990547643944181	T	T	T
0.3321194087614818	0.6673957154164433	0.0046867057131234	T	T	T
0.6695933665953140	0.6681903150502317	0.0020932626816020	T	T	T
0.4437494306571659	0.5570993204881617	0.0661621596596997	T	T	T
0.4516672572928060	0.5344455817939254	0.1222245812406540	T	T	T
0.5129733614724250	0.2171563256152277	0.1312701627688148	T	T	T
0.4947732939217057	0.3373499794746556	0.1361377397679407	T	T	T
0.6566400340404748	0.2646087552159254	0.1366569190963556	T	T	T
0.4882156746485260	0.1825608037998087	0.0737666959905651	T	T	T

FS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

36 1 2 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F

0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.2234876750610753	0.1131889532563175	0.9014275841812964	T	T	T
0.5556234817411966	0.1105011547572183	0.9007422966433606	T	T	T
0.8890171471684221	0.1109159233792877	0.9010717088634380	T	T	T
0.2240669694447532	0.4453555511245185	0.9014572222834638	T	T	T
0.5555164007030279	0.4449155351754079	0.9005402609708193	T	T	T
0.8895256717543908	0.4445323991712247	0.9008051970378176	T	T	T
0.2242757964552533	0.7758672560684251	0.9021023098824004	T	T	T
0.5551476324357213	0.7766123418033236	0.9014226687533052	T	T	T
0.8866608736838462	0.7763741448693697	0.9017211392406100	T	T	T
0.0002780632554248	0.9995409815809970	0.9983948850064632	T	T	T
0.3334512444415504	0.0001578341927727	0.9985325263450844	T	T	T
0.6679564207218640	0.0029055920235901	0.9986206000960984	T	T	T
0.9986812183657752	0.3328011778334572	0.9982777439310664	T	T	T
0.3332020162258410	0.3275156585415226	0.0020277878323133	T	T	T
0.6683694507377964	0.3319947126140335	0.9975312235276582	T	T	T
0.0001057217654066	0.6671038039947270	0.9985586319450820	T	T	T
0.3308375911559157	0.6719185389169546	0.0050704967299819	T	T	T
0.6699711582051976	0.6670586745665499	0.0025128735304645	T	T	T
0.4380183812580591	0.5532277543473711	0.0612552816718712	T	T	T
0.4464651747503793	0.5443616581264140	0.1218285948156064	T	T	T
0.5593849798636112	0.2953647885662547	0.1507283399136244	T	T	T
0.4946991892405758	0.4444864713414967	0.1363780113326836	T	T	T
0.7053448074775175	0.3594886911253091	0.1518856028140523	T	T	T
0.5203644850665240	0.2071594891998776	0.1134563153788492	T	T	T

CO + H = CHO

IS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu	C	O	H
36	1	2	3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F

0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.2229314609640885	0.1125685174774553	0.9019316284974332	T	T	T
0.5547627277138687	0.1133361210427633	0.9025188968167800	T	T	T
0.8883748788762289	0.1110647031365032	0.8998542241588310	T	T	T
0.2238495971045999	0.4479977091929142	0.9007988903703384	T	T	T
0.5560448702625101	0.4440216742788678	0.9019516411642334	T	T	T
0.8867502678450573	0.4453662092774596	0.9022217890722812	T	T	T
0.2231348533242970	0.7770620853225949	0.8998131945718774	T	T	T
0.5520632620718926	0.7764982974336643	0.9010407203885088	T	T	T
0.8874392711277685	0.7770223770261124	0.9018753604141816	T	T	T
0.9985641080637676	0.0014149913548281	0.9982467717205956	T	T	T
0.3311969500992019	0.9991787860379380	0.9997358051060896	T	T	T
0.6702493403502814	0.0025399423323500	0.9968015687950864	T	T	T
0.9980077049076088	0.3297975323806635	0.9961572610435886	T	T	T
0.3300254806917506	0.3320466255257956	0.0004950984059826	T	T	T
0.6686718380526238	0.3320951839343500	0.0035188622597821	T	T	T
0.0010808042290584	0.6687867259984260	0.9994792901690532	T	T	T
0.3312274603775217	0.6680477672831318	0.0052837689996387	T	T	T
0.6680684223174269	0.6702990108937283	0.0004721432208362	T	T	T
0.4483597718987903	0.5520020999498589	0.0664910604655576	T	T	T
0.4579780368907364	0.5429674181856950	0.1223145656873195	T	T	T
0.6834064705053541	0.3226998209355982	0.1135119904557411	T	T	T
0.6231105504922378	0.3977474630547236	0.1312151456485825	T	T	T
0.8245536178792044	0.3973973287086328	0.1252756155448070	T	T	T
0.2164570427211628	0.7820026940170818	0.0451839022576253	T	T	T

TS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
36 1 2 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
-0.0000000000000004	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777793	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F



0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777793	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.1111111111111142	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444428	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.2243616418424313	0.1125880757509539	0.9011990936263461	T	T	T
0.5569503858834569	0.1126460658555959	0.9023266472022680	T	T	T
0.8895207813407191	0.1101059413447702	0.8996779431800337	T	T	T
0.2248187823304403	0.4468444853106601	0.9008640811553790	T	T	T
0.5576613115869496	0.4424073297080695	0.9021787403185187	T	T	T
0.8871135536341368	0.4429071840104660	0.9019583375482302	T	T	T
0.2249138508540836	0.7752795481720549	0.9010428498309577	T	T	T
0.5536704938272654	0.7756551436997686	0.9009438131979784	T	T	T
0.8874793746217065	0.7758538857549451	0.9010351595970242	T	T	T
0.0006234294626945	0.9992305083689472	0.9975499154751538	T	T	T
0.3322015259384737	0.9993128042650476	0.9977842522111811	T	T	T
0.6717744201179046	0.0008208915085337	0.9964707210812449	T	T	T
0.9991897038930466	0.3284783875541764	0.9959901847336687	T	T	T
0.3322745266719777	0.3317447745915001	0.0002815240989960	T	T	T
0.6699656463615824	0.3297250400385390	0.0035531340238118	T	T	T
-0.0002092705952703	0.6667384221672380	0.9973953132983494	T	T	T
0.3294045380968151	0.6689865591147621	0.0030228703025498	T	T	T
0.6690122565551655	0.6674750725975429	0.0003253551296785	T	T	T
0.4403750713910343	0.5643375094537116	0.0682280888837830	T	T	T
0.4685616583522685	0.5320597560324781	0.1219207225422326	T	T	T
0.6687525370237177	0.3163178477334246	0.1081823000128702	T	T	T
0.6061806329897905	0.3939765196960873	0.1230445590264703	T	T	T
0.8060522908164356	0.3859049619941069	0.1238122900133893	T	T	T
0.3262388266305378	0.6962209461591793	0.0749656760263326	T	T	T

FS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
36 1 2 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F

0.11111111111111143	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.11111111111111143	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.2245540423633866	0.1149289318661919	0.9012997062035174	T	T	T
0.5571827564826104	0.1137222423585786	0.9021219790951008	T	T	T
0.8896306093639880	0.1110002617704152	0.8996897827873303	T	T	T
0.2246654945268628	0.4463760483121981	0.9004532979039727	T	T	T
0.5579868151790677	0.4430593836351423	0.9027127125970900	T	T	T
0.8868828392772914	0.4436615716559189	0.9018463668086358	T	T	T
0.2239569645887640	0.7771307892997311	0.9006424520437847	T	T	T
0.5548233963773972	0.7766565680355596	0.9006739739658596	T	T	T
0.8861863741635296	0.7765148100696893	0.9012466913816440	T	T	T
0.0009548675165490	0.0006675211675096	0.9977627690000092	T	T	T
0.3316668519472377	0.0008752301588539	0.9969403922390960	T	T	T
0.6713046734075409	0.0003149738058215	0.9962447183110272	T	T	T
0.0018909967260684	0.3309437789824237	0.9959056351466810	T	T	T
0.3344906520928593	0.3368300697539183	0.0016064140121961	T	T	T
0.6719431354370702	0.3296535575094746	0.0032888283983434	T	T	T
0.0002027260187535	0.6688169262387675	0.9969280643022704	T	T	T
0.3294255289119899	0.6708838154558096	0.9992257727018508	T	T	T
0.6661617079312280	0.6670769783740709	0.0018480045421655	T	T	T
0.4470565075715986	0.5622446145434707	0.0732483733921403	T	T	T
0.4858161995231259	0.5108247999766307	0.1245701517969119	T	T	T
0.6681060372504983	0.3066394615768497	0.1039724010573325	T	T	T
0.6020660228281982	0.3850168329907723	0.1182508845118320	T	T	T
0.8035206023423432	0.3749826503291331	0.1210809638610246	T	T	T
0.3655251786250644	0.6553526735235425	0.0817110957441958	T	T	T

CO + CO = OC - CO

IS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
48 2 4 4

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F

0.5833333333333357	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.1662682963308046	0.0839756359995582	0.9005319638876450	T	T	T
0.4162674493018899	0.0848768448869953	0.9003556858946669	T	T	T
0.6663661283892102	0.0849419738536311	0.9010601218341932	T	T	T
0.9161927855225545	0.0835625949162112	0.9003030774739691	T	T	T
0.1648705157939611	0.3329859071593247	0.8972542351529191	T	T	T
0.4138825309011496	0.3328139644455577	0.9005222922966805	T	T	T
0.6660017418903020	0.3324511545061992	0.9014062578499222	T	T	T
0.9141221692335972	0.3316258693388092	0.9015361990500596	T	T	T
0.1672615504730030	0.5843385900531667	0.9011228533800272	T	T	T
0.4160991890352997	0.5815222664353703	0.9011238840482860	T	T	T
0.6647157700914754	0.5827625317892274	0.8991724482294525	T	T	T
0.9138226264493328	0.5825564833512412	0.8998834304009248	T	T	T
0.1666441792877371	0.8318288243681755	0.9010081093757040	T	T	T
0.4142970555440283	0.8322646228643379	0.9007121718739070	T	T	T
0.6654664914789322	0.8336542758007937	0.8991798400257751	T	T	T
0.9166933502327894	0.8339527777648730	0.8994410957854280	T	T	T
0.9965471307605523	0.9966909630999740	0.9967172935574640	T	T	T
0.2472351877316380	0.9993215374841050	0.9965187295509930	T	T	T
0.4966738977982010	0.9983086916232909	0.9962093510024322	T	T	T
0.7477678295345779	0.9974770259909278	0.9960927120297942	T	T	T
0.9958522914980584	0.2469375783803335	0.9983235706726684	T	T	T
0.2456134771632056	0.2466553361798650	0.0003891502249804	T	T	T
0.4945385151770328	0.2469315571134339	0.9989442841167008	T	T	T
0.7478734163825622	0.2476302035757052	0.0028969126673948	T	T	T
0.9970127520103634	0.5008757082169812	0.9954184842995448	T	T	T
0.2493732151260438	0.5003865208182697	0.9973418172519112	T	T	T
0.4996258669484046	0.5029127239628243	0.0011887467627895	T	T	T
0.7508991592721499	0.5033272580213765	0.9988752219874040	T	T	T
0.9973106191544652	0.7500514018117539	0.9963676739200608	T	T	T
0.2480091114678808	0.7495327066928076	0.0027450576769807	T	T	T
0.5003781426105017	0.7508856494466116	0.9962327944089544	T	T	T
0.7494378713349452	0.7519036376043288	0.9959512632027528	T	T	T
0.1618114565573482	0.3364478725992909	0.0621127484706521	T	T	T
0.5825347651691460	0.4151269560360826	0.0623253245723814	T	T	T
0.1585589319105668	0.3425719752055704	0.1182175626196822	T	T	T
0.5900667694706682	0.4093152470706395	0.1185055676692141	T	T	T
0.7422013483376513	0.2330292969266062	0.1121622879449579	T	T	T
0.2518191086723475	0.7320630990773677	0.1137617310574225	T	T	T
0.7014985882137658	0.2952096286029012	0.1280202146970684	T	T	T
0.8430219704386456	0.2756818542508642	0.1296773428628800	T	T	T
0.2584010012282372	0.6423845188946454	0.1231591354242430	T	T	T
0.3490727334947649	0.8165109454565199	0.1261540468722842	T	T	T

TS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000			
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	O	H		
48	2	4	4		
Selective dynamics					
Direct					
0.0833333333333358	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333286	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333357	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333286	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.0833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333288	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.0833333333333358	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333287	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333357	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333288	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.0833333333333359	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333288	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333359	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333288	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.1658426867898084	0.0843276874571378	0.9006253357459431	T	T	T
0.4157595238023533	0.0840998941265365	0.8997191364228754	T	T	T
0.6663466209861886	0.0867228434050562	0.9012696152268741	T	T	T
0.9158816685619047	0.0838616740299426	0.8995611030238998	T	T	T
0.1654799959676526	0.3318331491910294	0.8991978758655967	T	T	T
0.4135566416966214	0.3334355718316616	0.8997867133069981	T	T	T
0.6661243488670701	0.3328960516399968	0.9015201343715142	T	T	T
0.9151146503863520	0.3334455178811817	0.9006149736104744	T	T	T
0.1700051674660730	0.5832379401593535	0.9010644009363116	T	T	T
0.4189768315967095	0.5823109599550453	0.9001940523252049	T	T	T
0.6666010011533650	0.5846717873855765	0.8993237332358857	T	T	T
0.9170357767090078	0.5841319666152838	0.8989281623725397	T	T	T
0.1678668510062621	0.8315619912682078	0.9011613909174500	T	T	T
0.4150234620054819	0.8314375261623398	0.9003614646482325	T	T	T
0.6676488840244189	0.8359044351888080	0.8990386087160120	T	T	T
0.9172958210900227	0.8340811086635773	0.8995478699044238	T	T	T
0.9960141984398987	0.9971513375127413	0.9969595648983798	T	T	T
0.2470809992683199	0.9983962640457312	0.9964993348866024	T	T	T
0.4967662182240715	0.9999269253146320	0.9951154811392104	T	T	T
0.7485058077033608	0.0007266879418756	0.9966095776645553	T	T	T
0.9932486125050407	0.2477735558849908	0.9954925309142757	T	T	T
0.2344372298872935	0.2402102751190531	0.0018044513838035	T	T	T
0.4904138031865793	0.2509575928112350	0.9971243652796900	T	T	T
0.7461932670754016	0.2513796955324919	0.0031039107839497	T	T	T
0.9991975412127396	0.4998046026740726	0.9949723860868436	T	T	T
0.2526622599463402	0.4942651949594189	0.9957679351576130	T	T	T

0.5149654181857268	0.5149476546350391	0.9999133641702169	T	T	T
0.7557237987348450	0.5066886472540590	0.9954556007056719	T	T	T
0.0006265590442336	0.7502724894618380	0.9968191016609217	T	T	T
0.2503416473398580	0.7471899486167954	0.0027135049165245	T	T	T
0.5046677522585366	0.7543019453306848	0.9952264703662315	T	T	T
0.7550710288167379	0.7563013438337830	0.9967777198727185	T	T	T
0.3113899215039860	0.4011374954498808	0.0699523927947121	T	T	T
0.4713411269006191	0.3686995442237272	0.0707235321897171	T	T	T
0.2785508273409567	0.4358282980649595	0.1197403434801982	T	T	T
0.5139078303737439	0.3520719181250810	0.1218885559588779	T	T	T
0.7223403795049533	0.2539502472921326	0.1075090292856111	T	T	T
0.2547320478210395	0.7085001291166300	0.1089858986836515	T	T	T
0.6538542475451288	0.2920562471426053	0.1189851722142986	T	T	T
0.8187716462573665	0.3220864170069555	0.1269943859839542	T	T	T
0.2645740206037631	0.6197663309121506	0.1184275468803102	T	T	T
0.3429872982852615	0.7939857857544041	0.1274227760715423	T	T	T

FS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
48 2 4 4

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.1654767107163147	0.0834389166505802	0.8999815110512078	T	T	T
0.4152754650884071	0.0837926906431551	0.8995868777192982	T	T	T
0.6664081354464990	0.0866133659119424	0.9009992618726240	T	T	T
0.9151769323599638	0.0832588643965150	0.8995534087149738	T	T	T
0.1660219188067451	0.3310937210301136	0.8998534715544085	T	T	T
0.4155061187852596	0.3347260278764730	0.8991240172618518	T	T	T
0.6659739009068119	0.3326509053166154	0.9015687003382168	T	T	T
0.9147841652091157	0.3326079648707945	0.9008608680751642	T	T	T
0.1697655572444852	0.5817575395397852	0.9020249399318386	T	T	T

0.4187547713088616	0.5835847816898375	0.8996178890820254	T	T	T
0.6672254969011921	0.5853947477552500	0.8992561517089047	T	T	T
0.9172398797520804	0.5833916136587395	0.8988646827555494	T	T	T
0.1674485597615840	0.8300853004209638	0.9011729599964600	T	T	T
0.4138051212634826	0.8305665066904941	0.9003240805862539	T	T	T
0.6675742288084155	0.8357198485747621	0.8991580188940289	T	T	T
0.9178934553026644	0.8341075939504985	0.8994857626607645	T	T	T
0.9962670711388104	0.9970701480869421	0.9967274832397350	T	T	T
0.2457714169244163	0.9951625049714072	0.9959173639191804	T	T	T
0.4966071759954556	0.0006327112356743	0.9943444929992776	T	T	T
0.7486958295999597	0.0012097840149606	0.9966335162719860	T	T	T
0.9947946307137180	0.2467647651502660	0.9956227488455972	T	T	T
0.2369805951942921	0.2373137658513463	0.0014050948422132	T	T	T
0.4891819324499078	0.2539388303505926	0.9965404302814352	T	T	T
0.7446814786445720	0.2511449391068469	0.0031404173036668	T	T	T
0.9987966573909282	0.4981324598045958	0.9951648517810276	T	T	T
0.2532952537116531	0.4906437878961689	0.9970819338912400	T	T	T
0.5142534597774232	0.5153527981545435	0.9988265170004076	T	T	T
0.7550476586381710	0.5068709501890392	0.9949672505418200	T	T	T
0.0001843764063346	0.7493181147470147	0.9968754577931958	T	T	T
0.2507352080748517	0.7460788737075372	0.0032556152543625	T	T	T
0.5054208973759908	0.7558168684025257	0.9946666208180917	T	T	T
0.7549938702621015	0.7560521053810743	0.9964901398821404	T	T	T
0.3431513832602345	0.4305409880084640	0.0702229185080272	T	T	T
0.4227932193756058	0.3389180900604337	0.0698998020448583	T	T	T
0.3103758431340164	0.4765461099902489	0.1188491222748279	T	T	T
0.4677769084864107	0.3033635091819131	0.1180869793389362	T	T	T
0.7036625468313837	0.2514371208515168	0.1049672901167186	T	T	T
0.2607389893740173	0.7122979005670234	0.1048126631131016	T	T	T
0.6193095438092417	0.2711117832688821	0.1138736684911104	T	T	T
0.7912010152534641	0.3283631562650413	0.1273530798283901	T	T	T
0.2801402302040810	0.6278192583139421	0.1141278164869226	T	T	T
0.3401657506826461	0.8011867350151765	0.1255696429201748	T	T	T

COH + H = CHOH

IS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
36 1 2 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F

0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F	F	F
0.2233527850031964	0.1121142515349254	0.9012054787511016	T	T	T
0.5557779182355804	0.1103189411803774	0.9005147813593821	T	T	T
0.8902257920025641	0.1134056807259001	0.9018488794276640	T	T	T
0.2244231930931948	0.4447615176138526	0.9019322221483648	T	T	T
0.5564091142819451	0.4452968994022109	0.9004035643676933	T	T	T
0.8895970812449471	0.4441693226984635	0.9003007347004864	T	T	T
0.2242862036888214	0.7750134973440266	0.9020227946638084	T	T	T
0.5524823092072481	0.7752656994790786	0.9018328998126440	T	T	T
0.8884157133832058	0.7757350976235841	0.9023490430650740	T	T	T
0.0011309160812835	0.0014840883230839	0.9980769737857422	T	T	T
0.3344701871563801	0.9992387255692230	0.9977271496782916	T	T	T
0.6666477393725000	0.0025343894709791	0.9985265808925944	T	T	T
0.9974879114588152	0.3331331968250186	0.0006495385786956	T	T	T
0.3345693531314697	0.3244867167912298	0.0014766653644698	T	T	T
0.6663200416020529	0.3307347003286255	0.9971262648873370	T	T	T
0.9996067236681350	0.6690308954261805	0.9999431758208480	T	T	T
0.3335053711860025	0.6688355757998053	0.0112802053979696	T	T	T
0.6701780213934446	0.6710559300708667	0.0018566542047646	T	T	T
0.4497676603208637	0.5413358224347489	0.0630191177794447	T	T	T
0.4644074364229669	0.5309989419347577	0.1231592666986159	T	T	T
0.5274885884211150	0.2467361730797246	0.1496554524620035	T	T	T
0.4901032097031569	0.4134477837467745	0.1367418908059964	T	T	T
0.6697569762024935	0.2946219742909479	0.1562139150082260	T	T	T
0.4946075355526134	0.1697210797435326	0.1099155389864029	T	T	T
0.0942722423813856	0.5546758510445569	0.0449310740247386	T	T	T

TS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000			
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			

Cu C O H  
36 1 2 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
-0.0000000000000004	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F

0.6666666666666643	0.333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.333333333333356	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777793	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777793	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.1111111111111142	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444428	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.2217533520437755	0.1107677551031395	0.9007114880239488	T	T	T
0.5545208585292640	0.1101936628454754	0.9002520228529810	T	T	T
0.8891368775300232	0.1118459790320446	0.9015113072255847	T	T	T
0.2233759760510003	0.4441487496960875	0.9014109455552938	T	T	T
0.5549403734045001	0.4436863224082063	0.9003947538861866	T	T	T
0.8897896478298200	0.4433735422928630	0.9011206484856551	T	T	T
0.2226453703479276	0.7741093599524503	0.9021537376707828	T	T	T
0.5521991156898487	0.7752128973191084	0.9020097806503728	T	T	T
0.8835223649631967	0.7745444332862321	0.9021495763389976	T	T	T
0.9977740340303954	0.9979863860509426	0.9980924107506430	T	T	T
0.3333821598207176	1.0001400815612937	0.9976708871587665	T	T	T
0.6694362592155213	0.0047358274265224	0.9984406010732478	T	T	T
0.0018331804715735	0.3346612141850382	0.0006270293952670	T	T	T
0.3362139327709135	0.3199920340865620	0.0006714282538948	T	T	T
0.6703431274014225	0.3314472554353159	0.9969146325379136	T	T	T
0.9955594310372431	0.6677598114702260	0.9985078190445015	T	T	T
0.3341713566276472	0.6811185189530315	0.0062650755235934	T	T	T
0.6604144581547737	0.6641229617932483	0.0032200994776259	T	T	T
0.4209020719228230	0.5380799974542971	0.0633574229062995	T	T	T
0.4393625772190689	0.5279377579454961	0.1239820954407547	T	T	T
0.5575244674870637	0.2767061940663834	0.1482959484605151	T	T	T
0.4911267810844003	0.4300486857918089	0.1354514671520554	T	T	T
0.7029025200089237	0.3388341714379359	0.1515688251871818	T	T	T
0.5229249535341057	0.1925137781468205	0.1101841631001006	T	T	T
0.1933699497959679	0.5036376662691274	0.0553611818628018	T	T	T

FS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

36 1 2 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F



0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.2238327403614363	0.1157387629990898	0.9021435207810994	T T T
0.5550851561346032	0.1112609548296980	0.9004248217388695	T T T
0.8888044606613601	0.1109323335864038	0.9003108562935269	T T T
0.2231906466918390	0.4449949391846730	0.9012827727640652	T T T
0.5550127708060341	0.4447288716563700	0.9013280554250184	T T T
0.8886003568521065	0.4447900705484846	0.9005210681198837	T T T
0.2223381228673463	0.7773100178339226	0.9007516515095012	T T T
0.5545903029959419	0.7761721460528407	0.9014026540490052	T T T
0.8842985776516350	0.7759969193962253	0.9021291495827372	T T T
0.9988798551352132	0.9999521415054016	0.9985465605074256	T T T
0.3330113657531274	0.0013935853507590	0.9979474199945864	T T T
0.6676634722556954	0.0001227115956445	0.9975403226348956	T T T
0.9986421603227326	0.3312146721061474	0.9977665432610396	T T T
0.3336111890291508	0.3350363734646704	0.0044611988614196	T T T
0.6694436716929143	0.3299851522415239	0.9962944214603509	T T T
0.9978524792172900	0.6663524198649813	0.9981254794335310	T T T
0.3269228525505679	0.6704969783072889	0.9984841395554096	T T T
0.6651019323816025	0.6641502292536375	0.0048433804942005	T T T
0.4527182260821096	0.5431706683357883	0.0746914078309213	T T T
0.4904166591162468	0.4887876796198518	0.1302206258093219	T T T
0.6404109199147734	0.2483507846230239	0.1390249220272056	T T T
0.5520197240085213	0.3990289610930646	0.1278132413315410	T T T
0.7865286368060138	0.3187744452374586	0.1409980202543077	T T T
0.6079142617980949	0.1596087408113455	0.1021013225234286	T T T
0.3828284094718276	0.6364462286537214	0.0872079227186146	T T T

COH + CO = OC-COH

IS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu	C	O	H	
48	2	4	5	

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.1664737080664770	0.0839122918778456	0.8991050794554719	T	T	T
0.4157746607322511	0.0838869441100863	0.8989180213584246	T	T	T
0.6663957481862809	0.0836988260286513	0.8992865876770797	T	T	T
0.9163689181103595	0.0838864733050550	0.8997160551500307	T	T	T
0.1670793068615760	0.3334170916684055	0.9007884625164805	T	T	T
0.4161650099347804	0.3337973749141621	0.9008522683022496	T	T	T
0.6644740560871173	0.3323532381065548	0.9007270781722306	T	T	T
0.9163552467533098	0.3342516106136439	0.8997457029680419	T	T	T
0.1666308939194946	0.5857440338145229	0.9021945791755607	T	T	T
0.4154712852670235	0.5823814895038298	0.8977204596567773	T	T	T
0.6648701122815556	0.5823415042598749	0.9006524870755609	T	T	T
0.9163876895977778	0.5840771620751519	0.8997088045980446	T	T	T
0.1678813238815825	0.8350205289611332	0.9025107898653610	T	T	T
0.4129863249614558	0.8309290360196347	0.9021603131550340	T	T	T
0.6646288253611032	0.8327061070930178	0.9003407003145910	T	T	T
0.9162764824354684	0.8334092176587007	0.8996922669063671	T	T	T
0.9954459161349685	0.9990533160755632	0.9963384997758973	T	T	T
0.2476673835323533	0.0005082953090187	0.9993434243685619	T	T	T
0.5029444071726100	0.0022502926341601	0.9948195392653906	T	T	T
0.7486698517342759	0.0009276915816374	0.9969457508045343	T	T	T
0.9958446142373334	0.2504478639667654	0.9967653674091144	T	T	T
0.2414370313786346	0.2504269143652723	-0.0001339915940848	T	T	T
0.5038803278752511	0.2503087794087156	0.0007395523070608	T	T	T
0.7499099985729817	0.2499151217820928	0.9977310230091302	T	T	T
0.9960877364326025	0.4990836982579068	0.9971580615501856	T	T	T
0.2457407825028789	0.4992036812238071	0.9980614582796945	T	T	T
0.5021852790535085	0.4996382652471053	0.0003919860037262	T	T	T
0.7505533700785548	0.5005161941780319	0.9968368771538203	T	T	T
0.9967652926469083	0.7494056696444471	0.9967513790958360	T	T	T
0.2480132508125091	0.7522457855186537	0.0048393973265167	T	T	T
0.5029814898904235	0.7522423382607071	0.9987117711260233	T	T	T
0.7517134522101840	0.7514362661896431	0.9968742569384170	T	T	T
0.4144518768813448	0.5830790502460004	0.0612298588029716	T	T	T

0.3310434735627844	0.1737719426027582	0.0568613533996428	T	T	T
0.4069216565629065	0.5852757386860379	0.1174548681216070	T	T	T
0.3297556969299602	0.1717762232234519	0.1184963300753142	T	T	T
0.5097319978314955	0.0642627940973027	0.1453452455958377	T	T	T
0.2557488483507831	0.7650457338468294	0.1115630195846729	T	T	T
0.4018917437133034	0.1398459738952426	0.1353816701232015	T	T	T
0.5721778448932122	0.0919371744213113	0.1067377961596556	T	T	T
0.5788011936998086	0.0925645411597497	0.1807669432142222	T	T	T
0.2840679998560235	0.6916869620141811	0.1255803871897770	T	T	T
0.3393617088956649	0.8625037125455807	0.1254934492414043	T	T	T

TS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
48 2 4 5

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333358	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333286	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333357	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333286	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.0833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333288	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.0833333333333358	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333287	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333357	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333288	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.0833333333333359	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333288	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333359	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333288	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.1660304451140484	0.0846411648351029	0.8996419036275516	T	T	T
0.4161166815891787	0.0860756897868293	0.8996117385356467	T	T	T
0.6661522199456470	0.0827035890557281	0.8993982401109797	T	T	T
0.9161301624472580	0.0837361800225865	0.8998793561337964	T	T	T
0.1680061474263461	0.3337811690956280	0.9006519667666810	T	T	T
0.4169690121129846	0.3362820197167385	0.8999551483509700	T	T	T
0.6651007715837549	0.3323981696067627	0.9007544372546605	T	T	T
0.9164721337361680	0.3328675015961876	0.8999411531478091	T	T	T
0.1676851549261690	0.5834995055810550	0.9020248746634989	T	T	T
0.4179533675322935	0.5818813961140533	0.8996869648533028	T	T	T
0.6667451755592015	0.5837155657780363	0.9001176590608642	T	T	T
0.9166365578718785	0.5829462852681174	0.8995119151440520	T	T	T
0.1676799325156243	0.8314981946343971	0.9012980953040808	T	T	T
0.4137493165995009	0.8307122742295275	0.9018237252915134	T	T	T
0.6658201867816061	0.8331062331737782	0.9004497642756920	T	T	T

0.9171921089604805	0.8334595500986690	0.8992425240970739	T	T	T
0.9975109839810936	0.9986186808490454	0.9964137758145190	T	T	T
0.2482154570995649	0.9984514337376577	0.9954787431792058	T	T	T
0.5011962203336278	0.0035705400433172	0.9949786898912625	T	T	T
0.7467973000738767	0.9994814522856768	0.9971427005130769	T	T	T
0.9952316923164451	0.2474648095044638	0.9965733557127400	T	T	T
0.2409260042014705	0.2410004605583194	0.0008950875136889	T	T	T
0.4961578125848686	0.2531875082885321	0.0007879293582827	T	T	T
0.7461571594155302	0.2487431276566889	0.9977122493297533	T	T	T
0.9970962400127110	0.4973416502970526	0.9964695270001520	T	T	T
0.2461851815903692	0.4960949097991238	0.9983194398541047	T	T	T
0.5207256335321260	0.5130638669374858	0.0004250836424238	T	T	T
0.7562901456000251	0.5019874969170680	0.9969333252864544	T	T	T
0.9998734854782757	0.7506398485658163	0.9967956650491568	T	T	T
0.2492151348913105	0.7516870030029079	0.0048651793659513	T	T	T
0.4999926973745454	0.7477365328832196	0.9979894088426358	T	T	T
0.7575177128617165	0.7563802182739658	0.9968214765121898	T	T	T
0.3939306262458406	0.5338860821838138	0.0670122785623529	T	T	T
0.4033955843332692	0.3457425853366261	0.0629420524546463	T	T	T
0.3926138828570303	0.5739439155554585	0.1205558448030582	T	T	T
0.4123844422548009	0.3203187584967414	0.1232439598642761	T	T	T
0.4571239355995139	0.0820599705583298	0.1397101920476373	T	T	T
0.2628010733403638	0.7585172835262342	0.1071086195482647	T	T	T
0.4130439888420440	0.2237805797003371	0.1306162470162586	T	T	T
0.5118821633446183	0.0994059421582788	0.0990589402502180	T	T	T
0.5331931300949525	0.1086577088318593	0.1723385416791023	T	T	T
0.3111861100020015	0.7009600196124337	0.1209902404051014	T	T	T
0.3244996561952789	0.8614879756980242	0.1232855770922645	T	T	T

FS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

48 2 4 5

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F

0.3333333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.1658349712725852	0.0834604086937177	0.8997838084016803	T	T	T
0.4162273723967920	0.0856678315619825	0.8999569644817941	T	T	T
0.6674666216199782	0.0848905323725238	0.8990919097496218	T	T	T
0.9156012392359236	0.0826564890972400	0.8998068286183704	T	T	T
0.1662291396493782	0.3312259491724769	0.9006633258527974	T	T	T
0.4159239361134754	0.3343810626578970	0.8999202984719999	T	T	T
0.6641007915188146	0.3333447389461427	0.9011359787309904	T	T	T
0.9167499494507010	0.3339364711384402	0.8995688433963797	T	T	T
0.1704873543923416	0.5828673780114286	0.9028510238452944	T	T	T
0.4188398774156176	0.5834471310610939	0.9002542599951412	T	T	T
0.6669270759890757	0.5843691176755789	0.9000994652627443	T	T	T
0.9177548315893784	0.5833509611543528	0.8993903187044853	T	T	T
0.1683113252205382	0.8305550012838737	0.9012299954183974	T	T	T
0.4148837615154417	0.8319290180953895	0.9003069898820323	T	T	T
0.6682077352281194	0.8352728549188074	0.8995001279259373	T	T	T
0.9182944443757806	0.8330460698792931	0.8992837739462384	T	T	T
0.9959920768279344	0.9958786388275392	0.9964503413704348	T	T	T
0.2474283030083817	0.9950992433147324	0.9954332558136212	T	T	T
0.5023192930597578	0.0058556253822441	0.9937384950894054	T	T	T
0.7491368193723316	0.0028780802476509	0.9975908734763740	T	T	T
0.9951256048741574	0.2473174836956344	0.9960235965935382	T	T	T
0.2374901578852399	0.2343326249948565	0.0009575419769880	T	T	T
0.4951405095379070	0.2569319329155218	0.0020213577635959	T	T	T
0.7471337450813527	0.2504841416345641	0.9971529190409129	T	T	T
0.9987590805546110	0.4969118593555326	0.9960180881245428	T	T	T
0.2550713415896183	0.4916322291314085	0.9982549846235786	T	T	T
0.5139730668851021	0.5148875068684995	0.0000032303679034	T	T	T
0.7545503576912338	0.5030915910809035	0.9964872251332000	T	T	T
0.0002526895404159	0.7483740184660219	0.9970474263020002	T	T	T
0.2524667335588497	0.7479518858564388	0.0034029036103327	T	T	T
0.5070340385189580	0.7572536065343154	0.9946672989248232	T	T	T
0.7557502552808648	0.7555040934507743	0.9965023904011130	T	T	T
0.3556099826752924	0.4365760460046393	0.0715286264106137	T	T	T
0.3992053482936409	0.3229400053328816	0.0713961096414210	T	T	T
0.3225316199729582	0.4937210168127629	0.1168241158128425	T	T	T
0.4177337684242353	0.2792554708837246	0.1295428568907268	T	T	T
0.4970329447910304	0.0477993239480803	0.1397629420272020	T	T	T
0.2781881314084897	0.7348033860118152	0.1018450704569638	T	T	T
0.4421260765490089	0.1974456552779662	0.1274854422922674	T	T	T
0.5684162583798736	0.0725962846765909	0.1044781308647839	T	T	T
0.5571418807054518	0.0682161947577914	0.1778532829683196	T	T	T
0.3013148770205998	0.6537462275978926	0.1126813605517854	T	T	T
0.3548477932083145	0.8303574638521030	0.1205883856326986	T	T	T

OC-CO + H = OC-COH

IS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
---------------------	--------------------	--------------------

```

-6.4258328740327499  11.1298690187710996  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  21.2960046855129015
Cu   C   O   H
60  2  4  5
Selective dynamics
Direct
0.0833333333333357  0.1333333333333329  0.8029049805823973  F F F
0.3333333333333286  0.1333333333333329  0.8029049805823973  F F F
0.5833333333333357  0.1333333333333329  0.8029049805823973  F F F
0.8333333333333286  0.1333333333333329  0.8029049805823973  F F F
0.0833333333333357  0.3333333333333357  0.8029049805823973  F F F
0.3333333333333286  0.3333333333333357  0.8029049805823973  F F F
0.5833333333333357  0.3333333333333357  0.8029049805823973  F F F
0.8333333333333286  0.3333333333333357  0.8029049805823973  F F F
0.0833333333333357  0.5333333333333314  0.8029049805823973  F F F
0.3333333333333286  0.5333333333333314  0.8029049805823973  F F F
0.5833333333333357  0.5333333333333314  0.8029049805823973  F F F
0.8333333333333286  0.5333333333333314  0.8029049805823973  F F F
0.0833333333333357  0.7333333333333343  0.8029049805823973  F F F
0.3333333333333286  0.7333333333333343  0.8029049805823973  F F F
0.5833333333333357  0.7333333333333343  0.8029049805823973  F F F
0.8333333333333286  0.7333333333333343  0.8029049805823973  F F F
0.0833333333333357  0.9333333333333300  0.8029049805823973  F F F
0.3333333333333286  0.9333333333333300  0.8029049805823973  F F F
0.5833333333333357  0.9333333333333300  0.8029049805823973  F F F
0.8333333333333286  0.9333333333333300  0.8029049805823973  F F F
0.1662797048686957  0.0676604531948252  0.8996050582827055  T T T
0.4165014363439567  0.0687384736555598  0.8996553135432886  T T T
0.6670106199241245  0.0674924229974136  0.8993071588623488  T T T
0.9171322806862744  0.0675546260375360  0.8997906101432670  T T T
0.1687188801670556  0.2669677637656808  0.9008632088020136  T T T
0.4178502898562322  0.2687099454772370  0.9025758610748332  T T T
0.6666396913791777  0.2678490862620552  0.8996388040365298  T T T
0.9157982266265748  0.2663872305124990  0.9003909863744871  T T T
0.1702522320871472  0.4674559542500702  0.9022786196266532  T T T
0.4183207141478933  0.4676251773240497  0.8994360282669110  T T T
0.6672093713573191  0.4680049895082674  0.9002829624846133  T T T
0.9181348333684076  0.4670626423212296  0.8996056763630943  T T T
0.1688918451482167  0.6656352257208658  0.9013155116776344  T T T
0.4151796327519102  0.6667608387522015  0.9006644689466233  T T T
0.6684987828679768  0.6676606000667605  0.8992848450376277  T T T
0.9187378797414718  0.6671061606556342  0.8993697714443795  T T T
0.1666721722248132  0.8662421667611641  0.8992766409107340  T T T
0.4178091155764438  0.8693189111832850  0.9001903918616228  T T T
0.6669605957363913  0.8671842613051024  0.8996260668067081  T T T
0.9171807400603889  0.8667630507134823  0.8996792731836821  T T T
0.9956168297839424  0.9971275875127305  0.9966286948451234  T T T
0.2466165528101087  0.9954116669586052  0.9952755607991850  T T T
0.5001354029538443  0.0018090650400292  0.9985471789676792  T T T

```

0.7513133207152973	0.0009509613673057	0.9963225498924988	T	T	T
0.9999391966771750	0.2001687189087002	0.9962749050082406	T	T	T
0.2415572947653505	0.1874129979050060	0.0004070856199060	T	T	T
0.4984599789518722	0.2037149585923996	0.0008794984179597	T	T	T
0.7500530668234429	0.2020734509154065	0.9982339588617932	T	T	T
0.9999166693072969	0.3994893786279472	0.9959300021476606	T	T	T
0.2552778339501798	0.3977655560560768	0.9981393063994156	T	T	T
0.5115577232247173	0.4136077474833772	0.0002035170209886	T	T	T
0.7531397190424639	0.4045524014007938	0.9960789982079836	T	T	T
0.0020673863785420	0.6015617979453247	0.9966434414953166	T	T	T
0.2525279336468197	0.6009346726874498	0.0036593347915815	T	T	T
0.5072160597365678	0.6077749530492772	0.9948118799751520	T	T	T
0.7574486865785293	0.6060837243497438	0.9968761679170602	T	T	T
0.0013707531361097	0.8005611993859818	0.9969063666894096	T	T	T
0.2519981445837616	0.8017034468863140	0.9962335056102010	T	T	T
0.5027752345704036	0.8045349070091825	0.9959047966320878	T	T	T
0.7515863586819069	0.8021221004797632	0.9971183788379336	T	T	T
0.3748222438672243	0.3781601643851401	0.0756871748032254	T	T	T
0.3527179670147936	0.2413842597224367	0.0806514638514976	T	T	T
0.3607418040630919	0.4256394457245617	0.1232857213321712	T	T	T
0.3772817833583040	0.2042169269139728	0.1288333173037397	T	T	T
0.5633120383127060	0.0858196134518043	0.1676258799555570	T	T	T
0.2652658925268144	0.5894789649619060	0.1055885107496800	T	T	T
0.5018115485355070	0.1232843478155300	0.1610161020220150	T	T	T
0.5853851895246082	0.1362823615791307	0.0395671745295019	T	T	T
0.6545204376200265	0.1480675668528306	0.1873630905790914	T	T	T
0.3057633150490878	0.5363226407200575	0.1177797618875765	T	T	T
0.3298751439449341	0.6673428297407653	0.1251471264845164	T	T	T

TS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
60 2 4 5

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333356	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333286	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F

0.3333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1649706149077609	0.0670398812965599	0.8997454185423224	T	T	T
0.4158185123649289	0.0689852817676000	0.9002749657921360	T	T	T
0.6661221683698840	0.0672227797379579	0.8993152357721013	T	T	T
0.9152146192289026	0.0665351277130685	0.8998613380958095	T	T	T
0.1667887881912551	0.2657469874611088	0.9008597921268402	T	T	T
0.4160934962484437	0.2686896683100704	0.9014813846020467	T	T	T
0.6647491628487346	0.2669779289535588	0.9004205064166142	T	T	T
0.9145694420468277	0.2657203425359198	0.9002321425888089	T	T	T
0.1691795204404783	0.4663690695472118	0.9027314393956291	T	T	T
0.4176128833496552	0.4674047287145174	0.8996343134087608	T	T	T
0.6668322389488764	0.4677689506044298	0.9001830017838874	T	T	T
0.9171769141588559	0.4666790409202268	0.8996511421436888	T	T	T
0.1682884656724719	0.6651152120435405	0.9016678001501153	T	T	T
0.4141509730790053	0.6659557433274944	0.9008556670978173	T	T	T
0.6676645278502802	0.6673980705057169	0.8993447443151642	T	T	T
0.9184991501525672	0.6669982514499114	0.8994537410121090	T	T	T
0.1661417562875746	0.8662107691942290	0.8993821564749266	T	T	T
0.4165561341812067	0.8683285581133745	0.8998687652071213	T	T	T
0.6658429257829965	0.8668797197042050	0.8997510859274617	T	T	T
0.9163487886077650	0.8660603875002097	0.8996915422595624	T	T	T
0.9935465339417626	0.9965489438218798	0.9965975265921382	T	T	T
0.2456099455768421	0.9954217682363252	0.9956658522987466	T	T	T
0.4996722690532451	0.0038324019190708	0.9975921205974883	T	T	T
0.7477831755796628	0.0006719943961955	0.9969402944146578	T	T	T
0.9962325590605384	0.1985612686212130	0.9963169532793956	T	T	T
0.2389830557300249	0.1868462696106019	0.0010947440051601	T	T	T
0.4947589833903566	0.2053986142394866	0.0019396748121748	T	T	T
0.7414949569089031	0.1987581377235590	0.9987999845845891	T	T	T
0.9963402726144557	0.3972402127608322	0.9959561300410352	T	T	T
0.2534905775707578	0.3946263604516851	0.9981200714945153	T	T	T
0.5117954325057492	0.4141056742249784	0.0001217570234339	T	T	T
0.7517607192355523	0.4031895802046457	0.9964166432340000	T	T	T
0.0006300247123986	0.6007922158428121	0.9968898729882077	T	T	T
0.2505930630650891	0.5992115958787033	0.0039043133579472	T	T	T
0.5060659085716975	0.6068489244168029	0.9949981031051568	T	T	T
0.7568789612787130	0.6059482843407746	0.9968679264299659	T	T	T
0.0004792990505078	0.8004511008741619	0.9970428065044675	T	T	T
0.2509977577499558	0.8013764638976812	0.9964168655748182	T	T	T
0.5009423479246455	0.8038491263293950	0.9960156677481797	T	T	T
0.7499275008214770	0.8019409766928913	0.9972461079528567	T	T	T
0.3626362339930849	0.3663084727082738	0.0739362789031097	T	T	T
0.3792266693209467	0.2533124837586631	0.0762031742268992	T	T	T



0.3390278964598797	0.4104805972808925	0.1217472323409283	T	T	T
0.4067804853145915	0.2194890010504345	0.1271743639361575	T	T	T
0.5596059070970839	0.1114716738880137	0.1278185077352962	T	T	T
0.2648313677110342	0.5814766286674898	0.1042735119933302	T	T	T
0.4938255797912848	0.1515215520433051	0.1310802495556295	T	T	T
0.5887205291910527	0.1205879196940477	0.0636115474326374	T	T	T
0.6553880613071879	0.1658146411716954	0.1481808269613989	T	T	T
0.2962683745385460	0.5207433428183987	0.1147629630901495	T	T	T
0.3385588209606524	0.6570096955946219	0.1236323508657030	T	T	T

FS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
60 2 4 5

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1657648880946807	0.0677600806374489	0.9003547609906722	T	T	T
0.4165152003409814	0.0704623039495815	0.9009939679591420	T	T	T
0.6665986101146516	0.0679506435042125	0.8995349446663036	T	T	T
0.9148357664159196	0.0663870709683763	0.8998225298089536	T	T	T
0.1666513119482898	0.2657851539108047	0.9007940851752928	T	T	T
0.4159611197363834	0.2689914457652219	0.9009007131721898	T	T	T
0.6639931029170173	0.2669968712831745	0.9012908250971852	T	T	T
0.9163659645064938	0.2671504321493336	0.8995144892923839	T	T	T
0.1702771363586805	0.4669464586779968	0.9026954722166852	T	T	T
0.4192734062155686	0.4677276284425201	0.9000843260855518	T	T	T
0.6676777768247605	0.4680965785833212	0.9002854888403862	T	T	T
0.9181105640468652	0.4674532488906765	0.8997061094111621	T	T	T

0.1692735323760907	0.6658016800176324	0.9019472269689154	T T T
0.4150827377419571	0.6662568178849279	0.9011594197451444	T T T
0.6685103194534335	0.6679409753999258	0.8993645455730028	T T T
0.9196951427013638	0.6678882446205205	0.8995614549585552	T T T
0.1671967289253276	0.8673274217170913	0.8996799862812551	T T T
0.4165603430626136	0.8677928077420256	0.8993074953003259	T T T
0.6663824613227134	0.8673314504174735	0.8998485774227395	T T T
0.9164136488836196	0.8662868724463851	0.8996568182345863	T T T
0.9931775120682852	0.9968910933072260	0.9966109985726772	T T T
0.2475445383470898	0.9977047858901370	0.9967278999949966	T T T
0.4992630991121225	0.0031482119575870	0.9957834463720464	T T T
0.7468623540341571	0.0013477088255008	0.9976594095950304	T T T
0.9945459509345064	0.1985032108356323	0.9961858747410028	T T T
0.2358172821165592	0.1880119248406253	0.0025339357067408	T T T
0.4938458714018445	0.2076145026139617	0.0031659081756815	T T T
0.7456757478630142	0.2008245854036216	0.9968147726269296	T T T
0.9988574166583970	0.3986556775610244	0.9957323743966220	T T T
0.2553091355414916	0.3944796573246359	0.9975110964924926	T T T
0.5162118771816717	0.4153056352848500	0.0010076910570079	T T T
0.7547465301795627	0.4038430951416877	0.9966839259916024	T T T
0.0023975177034463	0.6020460569665425	0.9971322829254622	T T T
0.2527341929550005	0.5998258853818293	0.0041814076914322	T T T
0.5078513997689851	0.6069094735531849	0.9952721673160110	T T T
0.7591091726855351	0.6076792138448913	0.9966659538817784	T T T
0.0023664071612007	0.8021433928352590	0.9972212084865320	T T T
0.2520084140772285	0.8024362690543287	0.9969027943049948	T T T
0.5017868933402493	0.8044391976230452	0.9963330187191248	T T T
0.7504218379041268	0.8026493977883828	0.9974085279512176	T T T
0.3535728565268556	0.3530617161797671	0.0716586500698696	T T T
0.4010446766658790	0.2636329149902014	0.0728473944971037	T T T
0.3184443853306212	0.3954411650960125	0.1179209413761697	T T T
0.4224732021544775	0.2352161487756312	0.1314730447112902	T T T
0.5277121635368206	0.0826359227884683	0.1485003981157366	T T T
0.2627448360434521	0.5749644845735750	0.1033352930882678	T T T
0.4589062616076086	0.1758648265066662	0.1326856995502163	T T T
0.5589959773119384	0.0622765687751691	0.1087911752322808	T T T
0.6185629738599976	0.1224174004013539	0.1740073278434358	T T T
0.2861606407203275	0.5085521571971925	0.1124468796227983	T T T
0.3393300857371493	0.6468865231515557	0.1245608359292692	T T T

CHO + H = CHO<sub>H</sub>

IS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

36 1 2 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F F F
--------------------	--------------------	--------------------	-------

0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F F F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.2235254455007126	0.1122462547277121	0.9016488479114499	T T T
0.5559205311927060	0.1125953102103735	0.9005654084703552	T T T
0.8861938268041037	0.1080130238810321	0.8999540945459480	T T T
0.2231544682744035	0.4436961481854578	0.9004957951982719	T T T
0.5566641949912666	0.4399025589393855	0.9033283975824424	T T T
0.8838221401986124	0.4402494899786236	0.9022340628313482	T T T
0.2232215512243701	0.7761641560798740	0.9008231161401010	T T T
0.5534499861340777	0.7758110565540539	0.9009096787947414	T T T
0.8842911107844503	0.7747882412871826	0.9010963254640147	T T T
0.9983562901519408	0.9979223693653464	0.9973164854242934	T T T
0.3304071487375073	0.9994137421222888	0.9987612478909272	T T T
0.6679361555955834	0.9981885900435984	0.9980086812739658	T T T
0.0003476032379557	0.3275613332759936	0.9961357055417220	T T T
0.3332233193130480	0.3341327711834020	0.0030808896937739	T T T
0.6737004183643792	0.3306102073943419	0.0078324443175033	T T T
0.9977186616340348	0.6660676464606125	0.9963151421476094	T T T
0.3251185129057129	0.6642372094972125	0.9989138907822124	T T T
0.6614074157403435	0.6637651182364382	0.0018023716711163	T T T
0.4378768596642340	0.5583586791264415	0.0749754425049067	T T T
0.4855929537588384	0.5177220934150967	0.1262861320344785	T T T
0.7413715493241305	0.3824052576947629	0.1146034512893778	T T T
0.6476960847805884	0.4317637627765855	0.1262432015132767	T T T
0.8751903540499912	0.4916741264777696	0.1246892973184357	T T T
0.5416079770077801	0.0848350472864893	0.0410560960730367	T T T
0.3473044267041360	0.6421799856303374	0.0823925170983369	T T T

TS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
36 1 2 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333356	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777790	0.2222222222222214	0.8029049805823975	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777790	0.5555555555555571	0.8029049805823975	F	F	F
0.1111111111111142	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.4444444444444428	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888856	0.8029049805823975	F	F	F
0.2254146156056580	0.1160103541537974	0.9023972828498835	T	T	T
0.5563439560646563	0.1125298470284644	0.8996927734523622	T	T	T
0.8890488652748177	0.1119642764984791	0.9005031231920321	T	T	T
0.2245939910997263	0.4468506434631318	0.9011962171869978	T	T	T
0.5571383147079372	0.4456717412673241	0.9010279301495115	T	T	T
0.8898402488093889	0.4462551026961461	0.9004363463666468	T	T	T
0.2245782392325283	0.7796891019028930	0.9012976017716817	T	T	T
0.5569240635300005	0.7797365882982907	0.9020675325513673	T	T	T
0.8868502261016638	0.7780855939275124	0.9020856825613951	T	T	T
0.0001779099407842	0.0020625183071019	0.9982951300975232	T	T	T
0.3385771343115463	0.0049231908762527	0.9993120815789717	T	T	T
0.6684045533281768	0.0061409811301315	0.9996039477622928	T	T	T
0.0013662021580703	0.3343083736257664	0.9975259064271879	T	T	T
0.3363802113150010	0.3391438948609813	0.0030192333020137	T	T	T
0.6712087950297069	0.3306009409453588	0.9966901980315572	T	T	T
0.0008682388268966	0.6688610362399516	0.9979752362955977	T	T	T
0.3302716701281114	0.6711707863370322	0.9992373843032183	T	T	T
0.6654260935909737	0.6651492238280611	0.0035879113817808	T	T	T
0.4530718740500893	0.5357390259454469	0.0787346740346100	T	T	T
0.4931231175106661	0.4676196189361719	0.1266836355025145	T	T	T
0.5892602329134902	0.1893350594954813	0.1271343390477923	T	T	T
0.5556004712078352	0.3035569739997849	0.1276539668992009	T	T	T
0.7319821304400420	0.2506261442832463	0.1371418805117227	T	T	T
0.5819463946546408	0.1470710044435913	0.0636552355626394	T	T	T
0.3895215088303088	0.6370868758485000	0.0909319452787772	T	T	T

FS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-3.8554997244196501	6.6779214112626404	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

36 1 2 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F F F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F F F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.7043574708735889	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.7043574708735889	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.8029049805823973	F F F
0.2238327403614363	0.1157387629990898	0.9021435207810994	T T T
0.5550851561346032	0.1112609548296980	0.9004248217388695	T T T
0.8888044606613601	0.1109323335864038	0.9003108562935269	T T T
0.2231906466918390	0.4449949391846730	0.9012827727640652	T T T
0.5550127708060341	0.4447288716563700	0.9013280554250184	T T T
0.8886003568521065	0.4447900705484846	0.9005210681198837	T T T
0.2223381228673463	0.7773100178339226	0.9007516515095012	T T T
0.5545903029959419	0.7761721460528407	0.9014026540490052	T T T
0.8842985776516350	0.7759969193962253	0.9021291495827372	T T T
0.9988798551352132	0.9999521415054016	0.9985465605074256	T T T
0.3330113657531274	0.0013935853507590	0.9979474199945864	T T T
0.6676634722556954	0.0001227115956445	0.9975403226348956	T T T
0.9986421603227326	0.3312146721061474	0.9977665432610396	T T T
0.3336111890291508	0.3350363734646704	0.0044611988614196	T T T
0.6694436716929143	0.3299851522415239	0.9962944214603509	T T T
0.9978524792172900	0.6663524198649813	0.9981254794335310	T T T
0.3269228525505679	0.6704969783072889	0.9984841395554096	T T T
0.6651019323816025	0.6641502292536375	0.0048433804942005	T T T
0.4527182260821096	0.5431706683357883	0.0746914078309213	T T T
0.4904166591162468	0.4887876796198518	0.1302206258093219	T T T
0.6404109199147734	0.2483507846230239	0.1390249220272056	T T T
0.5520197240085213	0.3990289610930646	0.1278132413315410	T T T
0.7865286368060138	0.3187744452374586	0.1409980202543077	T T T
0.6079142617980949	0.1596087408113455	0.1021013225234286	T T T
0.3828284094718276	0.6364462286537214	0.0872079227186146	T T T

COH + H = C + H<sub>2</sub>O

IS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
--------------------	--------------------	--------------------

```

-5.1406662992261998    8.9038952150168491    0.0000000000000000
 0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu   C   O   H
48  1  3  6
Selective dynamics
Direct
 0.0000000000000000    0.0000000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.3333333333333357    0.0000000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.6666666666666643    0.0000000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.0000000000000000    0.2500000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.3333333333333357    0.2500000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.6666666666666643    0.2500000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.0000000000000000    0.5000000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.3333333333333357    0.5000000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.6666666666666643    0.5000000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.0000000000000000    0.7500000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.3333333333333357    0.7500000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.6666666666666643    0.7500000000000000    0.7043574708735889    F F F
 0.1111111111111143    0.1666666666666643    0.8029049805823973    F F F
 0.4444444444444429    0.1666666666666643    0.8029049805823973    F F F
 0.7777777777777786    0.1666666666666643    0.8029049805823973    F F F
 0.1111111111111143    0.4166666666666714    0.8029049805823973    F F F
 0.4444444444444429    0.4166666666666714    0.8029049805823973    F F F
 0.7777777777777786    0.4166666666666714    0.8029049805823973    F F F
 0.1111111111111143    0.6666666666666643    0.8029049805823973    F F F
 0.4444444444444429    0.6666666666666643    0.8029049805823973    F F F
 0.7777777777777786    0.6666666666666643    0.8029049805823973    F F F
 0.1111111111111143    0.9166666666666644    0.8029049805823973    F F F
 0.4444444444444429    0.9166666666666644    0.8029049805823973    F F F
 0.7777777777777786    0.9166666666666644    0.8029049805823973    F F F
 0.2244946864643007    0.0849890659811641    0.9017801853602310    T T T
 0.5581575234769860    0.0836280232748667    0.9000512653309073    T T T
 0.8921943694957329    0.0832777428247473    0.9013036441235364    T T T
 0.2266022879105825    0.3347022736284734    0.9006985931045995    T T T
 0.5584024336891519    0.3346302148420808    0.8997561718780088    T T T
 0.8923938208120780    0.3347317292049707    0.9001122540336702    T T T
 0.2267798656967173    0.5830575550856987    0.9017027595026924    T T T
 0.5586924971120240    0.5845272869254813    0.9016677993161968    T T T
 0.8900905469719644    0.5850233257249693    0.9020650281755752    T T T
 0.2231681896557531    0.8337778286055323    0.9007734376344784    T T T
 0.5594205926255628    0.8335051987280053    0.9011996476924716    T T T
 0.8912700657609256    0.8337872263618604    0.8991393531126022    T T T
 0.0037596386679490    0.0008133496097562    0.0000826888183716    T T T
 0.3403332209609628    0.0012739418517868    0.9977525517636378    T T T
 0.6696652419134725    0.0032608513467156    0.9982259443693920    T T T
 0.0032374209625133    0.2515633601369098    0.9974202686250992    T T T
 0.3360562790390168    0.2468108324219593    0.0008819509353007    T T T
 0.6724907555042169    0.2498503542080262    0.9968964924989696    T T T
 0.0043793479305987    0.5024845925834076    0.9973400667708892    T T T

```

0.3362969660875232	0.5064736307520734	0.0034581449863501	T	T	T
0.6700552960235547	0.4972959724316556	0.0007794472671651	T	T	T
0.0030519991768499	0.7518207778463952	0.0000662060433745	T	T	T
0.3370816476479037	0.7531305870783841	0.9974454708752184	T	T	T
0.6738693002272288	0.7546304430008575	0.0004013693228919	T	T	T
0.4396978764036312	0.4156823409981873	0.0600064257791653	T	T	T
0.4509069515347902	0.4113646990958293	0.1208253252156303	T	T	T
0.5437689520864309	0.2168575170545967	0.1525534897298989	T	T	T
0.6577937943357371	0.7310254104862374	0.1821096883495155	T	T	T
0.4920770786334265	0.3323640618041260	0.1362464362847343	T	T	T
0.6815998013748776	0.2575388494869879	0.1668575156833285	T	T	T
0.5325342330356178	0.1601152637240051	0.1138903834304281	T	T	T
0.5755840838148982	0.6284797973351142	0.1667076412165029	T	T	T
0.7483036675410959	0.7833065008822598	0.1473513691193082	T	T	T
0.8947016482305513	0.8381857593356984	0.0442993367656527	T	T	T

TS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
48 1 3 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
0.0000000000000000	0.2500000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
0.3333333333333357	0.2500000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
0.6666666666666643	0.2500000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
0.0000000000000000	0.5000000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
0.3333333333333357	0.5000000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
0.6666666666666643	0.5000000000000000	0.7043574708735977	F	F	F
-0.0000000000000001	0.7500000000000002	0.7043574708735977	F	F	F
0.3333333333333356	0.7500000000000002	0.7043574708735977	F	F	F
0.6666666666666643	0.7500000000000002	0.7043574708735977	F	F	F
0.1111111111111143	0.1666666666666644	0.8029049805824106	F	F	F
0.4444444444444429	0.1666666666666644	0.8029049805824106	F	F	F
0.7777777777777793	0.1666666666666644	0.8029049805824106	F	F	F
0.1111111111111143	0.4166666666666714	0.8029049805824106	F	F	F
0.4444444444444429	0.4166666666666714	0.8029049805824106	F	F	F
0.7777777777777786	0.4166666666666714	0.8029049805824106	F	F	F
0.1111111111111071	0.6666666666666645	0.8029049805824106	F	F	F
0.4444444444444428	0.6666666666666645	0.8029049805824106	F	F	F
0.7777777777777786	0.6666666666666645	0.8029049805824106	F	F	F
0.1111111111111048	0.9166666666666647	0.8029049805824106	F	F	F
0.44444444444444340	0.9166666666666647	0.8029049805824106	F	F	F
0.7777777777777761	0.9166666666666647	0.8029049805824106	F	F	F
0.2246435505652497	0.0857070840087234	0.9019319147454745	T	T	T
0.5558314688649147	0.0828977758121459	0.9005125500502845	T	T	T

0.8903102051164369	0.0832082698487397	0.9010396094485434	T	T	T
0.2242266135515448	0.3334745094587712	0.9009778859762834	T	T	T
0.5563360290230297	0.3338100379484266	0.8999781241819722	T	T	T
0.8908212485544700	0.3335167964587352	0.9005084892736912	T	T	T
0.2248712248734690	0.5824652064359561	0.9017349820385110	T	T	T
0.5550122863372893	0.5826456148015934	0.9002648388508488	T	T	T
0.8893049894242269	0.5838319719718488	0.9008002133488016	T	T	T
0.2213730783658827	0.8332510253806008	0.9006449292148662	T	T	T
0.5567974634897104	0.8330588589673018	0.9005832432230830	T	T	T
0.8906946704954182	0.8338322402769842	0.8996424733034442	T	T	T
-0.0000830641354197	0.9986489832921633	0.9987796090911797	T	T	T
0.3339212457765625	0.9981306693698760	0.9983064972318821	T	T	T
0.6670105716670085	0.0001022485930008	0.9986293468093829	T	T	T
-0.0009559261428878	0.2491194419419447	0.9983789823665005	T	T	T
0.3329090334300138	0.2442456111777518	0.0031044229715105	T	T	T
0.6686603224676566	0.2479593976375343	0.9968214885596887	T	T	T
0.0007148516231706	0.5007836194891110	0.9973068888599486	T	T	T
0.3318468869784114	0.5060499448050848	0.0031507765588547	T	T	T
0.6694412195094528	0.4990482383673415	0.9987853742549967	T	T	T
0.9971292013912092	0.7505519190789393	0.0000772494513251	T	T	T
0.3337362419945138	0.7523476886818788	0.9974137308849110	T	T	T
0.6722881403788018	0.7533412730103137	0.9975228595279131	T	T	T
0.4381503582817411	0.4162509415080048	0.0582426253425248	T	T	T
0.4797190028380349	0.4325577781355509	0.1203267640907092	T	T	T
0.5703741643790184	0.2277703233104283	0.1479612051665153	T	T	T
0.7681399665088525	0.7240077584871955	0.1289464753248916	T	T	T
0.5166565523633166	0.3530046527380544	0.1348159085709374	T	T	T
0.7132118164926735	0.2671204855744768	0.1404331252008726	T	T	T
0.5060399637391033	0.1573056900506311	0.1126347516355344	T	T	T
0.6537231835056112	0.6158961389353436	0.1310002831229772	T	T	T
0.7079202893186103	0.7883191989187464	0.1329378421514206	T	T	T
0.8189840328512796	0.7417012027364046	0.0711669013219418	T	T	T

FS

7.7109994488393001	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

48 1 3 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.2500000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.2500000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.2500000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.0000000000000000	0.5000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.3333333333333357	0.5000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F
0.6666666666666643	0.5000000000000000	0.7043574708735889	F	F	F



0.0000000000000000	0.7500000000000000	0.7043574708735889	F F F
0.3333333333333357	0.7500000000000000	0.7043574708735889	F F F
0.6666666666666643	0.7500000000000000	0.7043574708735889	F F F
0.1111111111111143	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.1666666666666643	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.4166666666666714	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.6666666666666643	0.8029049805823973	F F F
0.1111111111111143	0.9166666666666644	0.8029049805823973	F F F
0.4444444444444429	0.9166666666666644	0.8029049805823973	F F F
0.7777777777777786	0.9166666666666644	0.8029049805823973	F F F
0.2259132859875435	0.0863560911633141	0.9019374556629252	T T T
0.5571807667918519	0.0839566174773751	0.9006202893720471	T T T
0.8921507958512528	0.0843594153192785	0.9009151126691136	T T T
0.2258330380750559	0.3343605188041950	0.9010806391572980	T T T
0.5570459974216473	0.3345953147356553	0.9003315970036142	T T T
0.8919099520210673	0.3342329732255545	0.9005651686838073	T T T
0.2265202999862148	0.5833320066629307	0.9017813754006792	T T T
0.5564153979692417	0.5833572450523018	0.9003809787837570	T T T
0.8899597164456574	0.5838244675983968	0.9006125033075399	T T T
0.2243998266908560	0.8345433748536806	0.9000110652445976	T T T
0.5579632996408981	0.8340284946577571	0.9005327606760015	T T T
0.8909261688184288	0.8339037225519540	0.8999304240846004	T T T
0.0003417164685939	0.9980887585268838	0.9983722846863690	T T T
0.3359645490621527	0.9990295566610154	0.9986142002835284	T T T
0.6702464130668701	0.0019479883715768	0.9986643501715632	T T T
0.0016829494698668	0.2509403535243751	0.9984876437671890	T T T
0.3304127125938509	0.2418063561725058	0.0036315041441884	T T T
0.6709589636070720	0.2503332509648055	0.9968353104956840	T T T
0.0038657514182960	0.5027677099626169	0.9975369900393102	T T T
0.3335693728459941	0.5074785431541564	0.0039140910847079	T T T
0.6770551079999312	0.5042483576559951	0.9995928380610500	T T T
0.0047117189311821	0.7528334643317740	0.9977236227441296	T T T
0.3372053370300354	0.7544284619372390	0.9976513484926290	T T T
0.6718952077813203	0.7543492051664547	0.9974425596493726	T T T
0.4465999187727303	0.4169830687475571	0.0553776655345772	T T T
0.4768956467961803	0.4247309970670450	0.1228577277248614	T T T
0.5852243310246219	0.2350055432431525	0.1454756259592351	T T T
0.7198732379868643	0.6955863769056737	0.1468892451439927	T T T
0.5275218943648247	0.3486599740707715	0.1356920762438490	T T T
0.7237404255491450	0.2752372185933492	0.1309876165076359	T T T
0.5071755068031957	0.1584292256966440	0.1131379970094388	T T T
0.5781704468590425	0.5392286789150373	0.1358901546688196	T T T
0.6512900065417407	0.7537841684240359	0.1494323681296776	T T T
0.7987739360232142	0.7312837474770044	0.1073180423566572	T T T

OCCOH + H = HOCCOH

IS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

60 2 4 6

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F F F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F F F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F F F
0.8333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F F F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F F F
0.3333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F F F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F F F
0.8333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F F F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F F F
0.3333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F F F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F F F
0.8333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F F F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F F F
0.3333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F F F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F F F
0.8333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F F F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F F F
0.3333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F F F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F F F
0.8333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F F F
0.1665055661218767	0.0684928213415244	0.9002558088209729	T T T
0.4171296638543701	0.0699274296817930	0.9005532424415769	T T T
0.6669123883657748	0.0678330198000344	0.8992462188492824	T T T
0.9160198693252016	0.0669725840566234	0.8997168579671087	T T T
0.1687095460384941	0.2673465188961190	0.9019543788113698	T T T
0.4169461509534795	0.2693587602863760	0.9005751390876456	T T T
0.6642944465614915	0.2670650170660679	0.9007223194058480	T T T
0.9181748537730936	0.2680568778071463	0.8998772322766074	T T T
0.1696394661860121	0.4656979327723054	0.8992556081738030	T T T
0.4184591427596179	0.4693835312589273	0.9030290038462834	T T T
0.6668714121617917	0.4680423814929210	0.8997531232871376	T T T
0.9192515124935122	0.4675406346055281	0.8998200748499700	T T T
0.1682294475128308	0.6667142080474375	0.8996280335833662	T T T
0.4175063174020585	0.6661546640591109	0.9017678610323138	T T T
0.6649805685433481	0.6670471815649610	0.9013312960795984	T T T
0.9188057246191332	0.6681894347614205	0.8992097258864387	T T T
0.1676382514802576	0.8683287311024357	0.8995314609520937	T T T
0.4164701485492217	0.8674105171381674	0.8991056980984538	T T T
0.6667005473248788	0.8678206044672567	0.8997355312900033	T T T
0.9167149804947916	0.8665424884725290	0.8993605325016993	T T T

0.9953088244682156	0.9978654215394230	0.9966686735142396	T	T	T
0.2484195671678355	0.9978691968013440	0.9965408990878920	T	T	T
0.5000387762435367	0.0029609093909566	0.9954761788165144	T	T	T
0.7471835233852844	0.0014207510518006	0.9973700055422068	T	T	T
0.9945961966962376	0.1964782128595945	0.9964289414693140	T	T	T
0.2376608693614172	0.1894012765008222	0.0025516099262186	T	T	T
0.4967014108261453	0.2048040560205181	0.0015102613350524	T	T	T
0.7484318386248282	0.2014074898766248	0.9958846542172995	T	T	T
0.0027583481234147	0.4000656105128050	0.9977115082065396	T	T	T
0.2541457058986063	0.3952587635182827	0.0028178658942106	T	T	T
0.5152123637671766	0.4124397275062054	0.9995876954313850	T	T	T
0.7559892302496526	0.4039466277750947	0.9956420372497272	T	T	T
0.0019568107476668	0.6037153519979097	0.9967074635488360	T	T	T
0.2479810062740716	0.5998477130996679	0.9971964368781560	T	T	T
0.5083533126350698	0.6097726260891709	0.0033416774074686	T	T	T
0.7592977252883851	0.6067677962531662	0.9961117211405550	T	T	T
0.0023227817793809	0.8026046116551592	0.9972105761278768	T	T	T
0.2511870963220041	0.8012461460730724	0.9963611466012730	T	T	T
0.5005154866277907	0.8053827882393302	0.9961223871783604	T	T	T
0.7535850075588362	0.8053590689721212	0.9962602865534658	T	T	T
0.3661416818067608	0.3456205041977963	0.0732739932992677	T	T	T
0.4066121216869754	0.2520542651976922	0.0728346260232550	T	T	T
0.3412749490897162	0.3905843500652706	0.1214646822283976	T	T	T
0.4257372293878960	0.2200351682222108	0.1308880230506082	T	T	T
0.5737900994127944	0.0983450936364712	0.1454930203261104	T	T	T
0.4823227918307676	0.6192981287235857	0.1015496905778850	T	T	T
0.4741162810509678	0.1687374402623165	0.1309558590498682	T	T	T
0.6046705489894088	0.0781957704031191	0.1055660933936414	T	T	T
0.6674657855134515	0.1515248823905609	0.1672915616579511	T	T	T
0.4245515597758224	0.5316626382086155	0.1158782826086872	T	T	T
0.1649286173763169	0.4674010389191261	0.0396942486484398	T	T	T
0.5770936839030015	0.6580462047466582	0.1244148145589772	T	T	T

TS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
60 2 4 6

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333356	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333286	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F

0.333333333333285	0.533333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.583333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.833333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.083333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.333333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.583333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.833333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.083333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.333333333333285	0.933333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.583333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.833333333333284	0.933333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1660656050886316	0.0680113179554515	0.9006427667130251	T	T	T
0.4170137050370431	0.0700914728623896	0.9008700763643236	T	T	T
0.6664374421387814	0.0674609826449524	0.8994782015428180	T	T	T
0.9153142509485271	0.0665804492878265	0.8999980734815679	T	T	T
0.1675908414547899	0.2660063491884199	0.9014394868455876	T	T	T
0.4163750114961038	0.2688072873886971	0.9007377555151593	T	T	T
0.6647228135533232	0.2671024519723765	0.9007427042921607	T	T	T
0.9176412620544511	0.2679814600184157	0.8998431714107649	T	T	T
0.1699398666419200	0.4648974656091208	0.9000286132005131	T	T	T
0.4187733420786567	0.4670620011559308	0.9008222274307058	T	T	T
0.6664434803431902	0.4675605174793345	0.9003392292210479	T	T	T
0.9183832333321378	0.4672089758951725	0.8995857019389794	T	T	T
0.1679739413128793	0.6668141762001831	0.8993949444551238	T	T	T
0.4164193156518949	0.6662902373482273	0.8999554837830892	T	T	T
0.6679736565689762	0.6676751328460987	0.8995806814016275	T	T	T
0.9190905695519938	0.6675840188057539	0.8997185737005690	T	T	T
0.1673850219005377	0.8679766937392224	0.8997889832768678	T	T	T
0.4166183127066178	0.8673745083375656	0.8994856773660415	T	T	T
0.6663056511345833	0.8672938832028757	0.9001234484746480	T	T	T
0.9162871169383993	0.8662829361326041	0.8998809359643170	T	T	T
0.9932081994624216	0.9964782670572944	0.9969184895512014	T	T	T
0.2480202998544462	0.9978129611749462	0.9968786248162230	T	T	T
0.4995553296260957	0.0021393014035520	0.9959087732743019	T	T	T
0.7461241308725711	0.0002796169482262	0.9976600435686706	T	T	T
0.9943745014165623	0.1976892314209513	0.9964298880051154	T	T	T
0.2358470773247936	0.1888907881599607	0.0029729661667213	T	T	T
0.4956331730163718	0.2062116164191768	0.0010173200453965	T	T	T
0.7485313879445969	0.2015763104549677	0.9957936915234240	T	T	T
0.0061181345799007	0.4025560468342821	0.9977510101348546	T	T	T
0.2566031078413184	0.3962489462723335	0.0002747770227533	T	T	T
0.5163198673402083	0.4138374475371402	0.0023490760227564	T	T	T
0.7562475369289849	0.4039632110268586	0.9958357284135519	T	T	T
0.0032498835290451	0.6024589051019400	0.9970643708951181	T	T	T
0.2494313184256785	0.5973658501936724	0.9969799219681750	T	T	T
0.5050257178873914	0.6054186598193744	0.9960273698811579	T	T	T
0.7582995465027009	0.6067035976922369	0.9965216808266467	T	T	T
0.0021270915005526	0.8017053071008828	0.9973991483067295	T	T	T
0.2512878905238728	0.8005208054554046	0.9966005332830211	T	T	T

0.4987950733355982	0.8010385149657325	0.9969200147371559	T	T	T
0.7496316865886641	0.8018277198015684	0.9974900412813442	T	T	T
0.3455018728666375	0.3387287651477222	0.0730892337304942	T	T	T
0.4143800592722593	0.2632854734056098	0.0718262935267765	T	T	T
0.3099088130798895	0.3717536882151861	0.1231861884666424	T	T	T
0.4420405039078242	0.2362630329704813	0.1297505308591816	T	T	T
0.5929951090592964	0.1163376972276950	0.1446202338159929	T	T	T
0.1648167748254008	0.4846901469819552	0.1274877767023328	T	T	T
0.4958141262302679	0.1890579013888562	0.1295886908568571	T	T	T
0.6206064283359906	0.0924178379276456	0.1050609225374692	T	T	T
0.6879504405859530	0.1671213195760303	0.1660813438465584	T	T	T
0.2276619034112069	0.4415668255054047	0.1284189327339778	T	T	T
0.1468207363667661	0.4867006673818020	0.0598325298822312	T	T	T
0.2332843633270488	0.5688986438249357	0.1382433670242084	T	T	T

FS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

60 2 4 6

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1655294595550417	0.0678437143712803	0.9008402321912768	T	T	T
0.4165527516476903	0.0696590256800155	0.9006099649636629	T	T	T
0.6661361586618072	0.0672836281419197	0.8995588437505345	T	T	T
0.9148190156553252	0.0662162280897697	0.9000399603301971	T	T	T
0.1670802898717337	0.2655621584963802	0.9009543309357140	T	T	T
0.4154432989016172	0.2686296177506636	0.9007418287447791	T	T	T
0.6642990505965113	0.2669260109417366	0.9007493612403052	T	T	T

0.9169228426243188	0.2669756203076126	0.8993467234467076	T	T	T
0.1709793868160389	0.4643487076951748	0.9011424135285422	T	T	T
0.4196297086211719	0.4668314165274335	0.9005477482933281	T	T	T
0.6668396770670494	0.4672095337424066	0.9008697602727096	T	T	T
0.9187072016103626	0.4671755483892949	0.8993853292973576	T	T	T
0.1679976672854249	0.6665637682066491	0.8993860216587268	T	T	T
0.4176777666331670	0.6664118025713399	0.8996247136550982	T	T	T
0.6680543631274914	0.6670065386594147	0.8997954150441148	T	T	T
0.9192982893820194	0.6672267808505374	0.8996393870242642	T	T	T
0.1672469751358246	0.8674326932587152	0.8997105965202120	T	T	T
0.4166613308948366	0.8669841008121187	0.8995946207368668	T	T	T
0.6663535808150393	0.8670033626422901	0.9001973251743430	T	T	T
0.9159020313461920	0.8656051994990510	0.8997544471190021	T	T	T
0.9917994646294224	0.9953885262120424	0.9967155058463012	T	T	T
0.2473138952294289	0.9971364068518532	0.9966612968055388	T	T	T
0.4988276717277743	0.0017794935534693	0.9958627367077084	T	T	T
0.7460074386084837	0.0001980122044938	0.9977246263141790	T	T	T
0.9935841934619596	0.1980306771168969	0.9963255415832288	T	T	T
0.2330054237438544	0.1872322125677967	0.0031033106268758	T	T	T
0.4938934592918672	0.2061237609323721	0.0005475507028971	T	T	T
0.7470771483579000	0.2009171870574538	0.9957918196868720	T	T	T
0.0033569825213254	0.4003844013376717	0.9959392737835754	T	T	T
0.2570038117860587	0.3956172543894535	0.0003717063977490	T	T	T
0.5189117376139643	0.4147265651363579	0.0031706372425268	T	T	T
0.7577169158507294	0.4039575143336032	0.9963687275686404	T	T	T
0.0051139256443692	0.6014297265346096	0.9972998151233682	T	T	T
0.2525034331493452	0.5998798649537652	0.9959648847148757	T	T	T
0.5044484483392094	0.6049629726064736	0.9962869856323056	T	T	T
0.7596467558199844	0.6068984170960504	0.9966994878190948	T	T	T
0.0024270641016260	0.8011252930100865	0.9973182267550148	T	T	T
0.2511097184034973	0.8001015510470891	0.9969882343735976	T	T	T
0.4999684859858633	0.8013801658318492	0.9973172315682513	T	T	T
0.7494069681331469	0.8010290900068590	0.9976073016529964	T	T	T
0.3406322780669328	0.3370914516718314	0.0708687671734569	T	T	T
0.4121178678403988	0.2658763450196792	0.0710377474896369	T	T	T
0.3104899739426540	0.3650356527051437	0.1281820455563023	T	T	T
0.4411359003582056	0.2377585217178046	0.1285104801562087	T	T	T
0.5982947153537602	0.1216353984503064	0.1435941254203958	T	T	T
0.1884148031411575	0.5078353829383287	0.1428988734374503	T	T	T
0.4971839965020511	0.1926868369662871	0.1277859982934095	T	T	T
0.6281630039440891	0.0986011561112360	0.1043174620756069	T	T	T
0.6920115979731278	0.1725137043000551	0.1658425457203097	T	T	T
0.2650088993082909	0.4181102713940584	0.1271197352986503	T	T	T
0.1439963923193135	0.5204045718909488	0.1046512052603068	T	T	T
0.2632149000611024	0.5883628218929309	0.1565291285521915	T	T	T

OCCOH + H = OCC + H<sub>2</sub>O

IS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H  
60 2 5 8

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.833333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.833333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.833333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.833333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.833333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.1657297172532533	0.0673892509192610	0.8999460584871632	T	T	T
0.4172381225714124	0.0706961601946185	0.9006073100929787	T	T	T
0.6668376384589667	0.0685569877589579	0.8996199529257710	T	T	T
0.9148711949967814	0.0662311491804821	0.8999104627524218	T	T	T
0.1660046152799113	0.2657058174466904	0.9003001306116409	T	T	T
0.4160041221972761	0.2697138856175069	0.9015120536611926	T	T	T
0.6636455743233495	0.2681425071375426	0.9020872556492487	T	T	T
0.9165578660082196	0.2674340171087063	0.8995921098139131	T	T	T
0.1715186311847052	0.4670864923028150	0.9025382884103931	T	T	T
0.4207541096527723	0.4679875361303866	0.9004403693294046	T	T	T
0.6676927304393951	0.4676966817819348	0.8992241409266051	T	T	T
0.9179131010013051	0.4674466357653655	0.9000567944171293	T	T	T
0.1697175052047104	0.6657513295757166	0.9018921713086629	T	T	T
0.4153121785760196	0.6664686691849658	0.9010459786565956	T	T	T
0.6687985815997616	0.6678090193525692	0.8992092857210672	T	T	T
0.9196374963681168	0.6677541374796686	0.8993144432874470	T	T	T
0.1679349879349950	0.8672669895142020	0.8992320191809027	T	T	T
0.4169793188853484	0.8679015623947177	0.8993294394227448	T	T	T
0.6661477230403146	0.8673920554922808	0.8997173514942509	T	T	T
0.9165532180954391	0.8662958704843636	0.8994582259035592	T	T	T
0.9921424921241654	0.9960434414369128	0.9966854773812108	T	T	T
0.2469829535279796	0.9965222641643284	0.9962964484995642	T	T	T
0.4997254413870988	0.0031979118905416	0.9956472555439446	T	T	T
0.7472097463514615	0.0018024672815865	0.9973849777873489	T	T	T

0.9946907544145759	0.1985270821611777	0.9963496240929408	T	T	T
0.2335066649653266	0.1857285837896290	0.0014440080911180	T	T	T
0.4906694126535134	0.2055708515139002	0.0025711750821019	T	T	T
0.7461229639682532	0.2017820641792208	0.9966885430624667	T	T	T
-0.0000154346300064	0.3988684970939115	0.9954774412081759	T	T	T
0.2569107595130027	0.3935846380100003	0.9973490779951937	T	T	T
0.5182997195140167	0.4153587931465478	0.0037403019212045	T	T	T
0.7567536964531560	0.4052342907915076	0.9989710344387208	T	T	T
0.0064138389959321	0.6035313725691419	0.9969180310842450	T	T	T
0.2534790357006837	0.5995509418101588	0.0043646523575594	T	T	T
0.5065129954525692	0.6072701351993498	0.9950753699669490	T	T	T
0.7610148457917322	0.6092438038739199	0.9971142380845638	T	T	T
0.0031695245055914	0.8027416918353052	0.9964418618112671	T	T	T
0.2530788319501663	0.8029412463827706	0.9972391434888399	T	T	T
0.5020713938609705	0.8046295787969771	0.9965327576354549	T	T	T
0.7503255655786280	0.8026916302924172	0.9967810521715119	T	T	T
0.3473734652304392	0.3506654742139950	0.0727341850655955	T	T	T
0.3869944607196061	0.2570420325311664	0.0722385374461489	T	T	T
0.3235524560011250	0.3972587695163842	0.1204832513336968	T	T	T
0.4141270587237930	0.2286049176993757	0.1305295455105333	T	T	T
0.4637391470087556	0.0436833858798361	0.1417503819132557	T	T	T
0.2607743300854585	0.5710014358747526	0.1027335262527717	T	T	T
0.6816946082953249	0.4416247312957057	0.1783334451939457	T	T	T
0.4322880250211217	0.1584828064906545	0.1305794070533507	T	T	T
0.4110727332123034	0.9838219262001278	0.1085109394165387	T	T	T
0.5697668532354401	0.0707589171731206	0.1342521486903657	T	T	T
0.2862223899923197	0.5058695591942249	0.1128685574014790	T	T	T
0.3306944423166123	0.6423992715178941	0.1261852614987851	T	T	T
0.5820959032017563	0.3721448804387537	0.1701005476719852	T	T	T
0.6609418223498502	0.4997590940978038	0.1983771623123882	T	T	T
0.6901516382619762	0.4842806577052682	0.0419472762987979	T	T	T

TS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
60 2 5 8

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333356	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333286	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F



0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1661044440137418	0.0672516039651619	0.9008129958222532	T	T	T
0.4167598025454903	0.0694816540612743	0.9003908865473197	T	T	T
0.6669513642083661	0.0675833805452398	0.8995785422648593	T	T	T
0.9151243980411108	0.0657264176720758	0.8999329569147693	T	T	T
0.1664335708923235	0.2649269066041749	0.9006879178914639	T	T	T
0.4154387945259670	0.2684914409625614	0.9006164549966359	T	T	T
0.6645254690051938	0.2672437940615285	0.9010918611238293	T	T	T
0.9171514001947881	0.2666393522979668	0.8995421141811488	T	T	T
0.1717330312659706	0.4662828794955097	0.9025596319816875	T	T	T
0.4200500395418807	0.4671949429253416	0.8999643923455523	T	T	T
0.6684794058129224	0.4676197187899331	0.8990440411490729	T	T	T
0.9191682959850800	0.4670295660572903	0.8995166917575925	T	T	T
0.1695803051812765	0.6649431779632362	0.9020635276953323	T	T	T
0.4155325732228886	0.6656826142017778	0.9010773857929661	T	T	T
0.6692033926374408	0.6669767250868655	0.8994835998148647	T	T	T
0.9199443715222501	0.6675072252895358	0.8993648700945908	T	T	T
0.1676975444942797	0.8666411974654067	0.8994323824445351	T	T	T
0.4169480428867692	0.8670112263286647	0.8993185854755649	T	T	T
0.6665974955993119	0.8665164185184894	0.8999420204354468	T	T	T
0.9165803362521082	0.8655043001416738	0.8995559090395187	T	T	T
0.9925381510429763	0.9949898734970301	0.9967871161949118	T	T	T
0.2474774622746272	0.9956076212909000	0.9966147196107434	T	T	T
0.4997935996412582	0.0020132998492761	0.9955966924187377	T	T	T
0.7472730221969764	0.0003994839350360	0.9975430066073306	T	T	T
0.9948369024995112	0.1974037913383537	0.9964042184728686	T	T	T
0.2345570424372060	0.1850817574767200	0.0042393961591891	T	T	T
0.4926115538270112	0.2047744508602259	0.0001716207647428	T	T	T
0.7468470942172101	0.2008230774727035	0.9963085498327433	T	T	T
0.9997101849804942	0.3976756357363415	0.9953855601844930	T	T	T
0.2557179296057638	0.3921621009906207	0.9975356873914862	T	T	T
0.5200244815122326	0.4138037765789888	0.9997297161708345	T	T	T
0.7573119880722075	0.4057415450633505	0.9973084021448881	T	T	T
0.0051987113222312	0.6018875087398288	0.9973797594989128	T	T	T
0.2536225873043715	0.5984435459220524	0.0039844658922530	T	T	T
0.5080084383236563	0.6054434585974301	0.9949776234971679	T	T	T
0.7604391874073864	0.6043575732381280	0.9982966804196260	T	T	T
0.0027115384347376	0.8009469680735299	0.9968804374565303	T	T	T
0.2529245583236516	0.8014134418488111	0.9972527961691052	T	T	T
0.5024370259534178	0.8031072147433015	0.9965629201029255	T	T	T

0.7507944761527755	0.8006375531183957	0.9971648311823755	T	T	T
0.3530620380547562	0.3532828532049462	0.0713742379612193	T	T	T
0.4046402154654659	0.2681879951928788	0.0694013924877157	T	T	T
0.3382276395493446	0.4046200109984163	0.1197196947926877	T	T	T
0.4566501179960394	0.2537739311126968	0.1276691937190291	T	T	T
0.4921665602928176	0.0608995158293522	0.1404515563258044	T	T	T
0.2597232185276455	0.5690434000728627	0.1028516583269970	T	T	T
0.7000482304208768	0.4720902665458581	0.1300358360042023	T	T	T
0.4698039939023097	0.1810677980620179	0.1288067101217569	T	T	T
0.4162141752949606	0.9953326653066508	0.1145978119464718	T	T	T
0.5869575251329183	0.0766373042319041	0.1211706040463798	T	T	T
0.2902232703877218	0.5062802777115787	0.1121762314318451	T	T	T
0.3306229503055791	0.6420913283370541	0.1249577231463497	T	T	T
0.6116843926858486	0.3871198571490278	0.1356867768680476	T	T	T
0.6624002261536261	0.5249369561691515	0.1439289852148580	T	T	T
0.7113666802981287	0.4873332482584198	0.0657371359391219	T	T	T

FS

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710640	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
60 2 5 8

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1664941860562752	0.0679574625781799	0.9007602299680028	T	T	T
0.4171599053776160	0.0702186766016493	0.9004646075219296	T	T	T
0.6676449409280730	0.0680343030255740	0.8995127059650756	T	T	T
0.9157594390708500	0.0664647162638030	0.9000545010511468	T	T	T
0.1676310960307856	0.2657096747810625	0.9011066148214538	T	T	T

0.4161843369682571	0.2690620281000192	0.9004711934402511	T	T	T
0.6652183900027158	0.2673863381516736	0.9007199808992780	T	T	T
0.9175964734140396	0.2673168465700942	0.8996049027623763	T	T	T
0.1721310141249915	0.4668291351145467	0.9028999338084960	T	T	T
0.4203495941030561	0.4676574785253458	0.9001025263622777	T	T	T
0.6694177652816014	0.4684584718540041	0.8996724327149083	T	T	T
0.9205665780731310	0.4678735092323950	0.8993032292610020	T	T	T
0.1702701570407633	0.6656069423908212	0.9021345533379914	T	T	T
0.4160908329765934	0.6660318789512455	0.9011745358702273	T	T	T
0.6694024215562085	0.6678277850676912	0.8992706257364798	T	T	T
0.9212397841574708	0.6681248594312791	0.8992769291964765	T	T	T
0.1679909991850132	0.8671668218970745	0.8994463215898780	T	T	T
0.4174344583124980	0.8677464599546872	0.8991896437968309	T	T	T
0.6673098386952480	0.8673076726620051	0.8999455137077590	T	T	T
0.9169399703552514	0.8659948697138392	0.8995999112590324	T	T	T
0.9935735707531520	0.9960706744521555	0.9967374430619886	T	T	T
0.2485465772330570	0.9964798008728807	0.9964633690653905	T	T	T
0.5006102974796625	0.0030150174600876	0.9953911286146241	T	T	T
0.7479822737606308	0.0013892020479594	0.9976980448193161	T	T	T
0.9956956142020223	0.1985446222479381	0.9963682357505679	T	T	T
0.2357609045003083	0.1859359172862091	0.0037816962335074	T	T	T
0.4955710051816632	0.2073150730836117	0.0004167227239577	T	T	T
0.7471930941847148	0.2010224072076502	0.9968001348237017	T	T	T
0.0011193769659043	0.3989355567206219	0.9960534805775152	T	T	T
0.2578216753890063	0.3943465644169232	0.9984391914912234	T	T	T
0.5217358190011673	0.4152210369674609	0.9998361273639204	T	T	T
0.7593081403631309	0.4049335865796713	0.9958926212870447	T	T	T
0.0042862402385290	0.6019663229129014	0.9977314013581796	T	T	T
0.2546958331882619	0.5995575530448189	0.0043819529709344	T	T	T
0.5097180216566033	0.6064025091924274	0.9952086760771111	T	T	T
0.7621031949575646	0.6078876823355930	0.9967173885994921	T	T	T
0.0040641113484367	0.8020331163529172	0.9974268697678728	T	T	T
0.2535400717461717	0.8021969890373422	0.9972386043472894	T	T	T
0.5032491201579354	0.8042715522771103	0.9964369587314443	T	T	T
0.7517412693185517	0.8023010340775237	0.9975007478933374	T	T	T
0.3567106014156445	0.3585840466907810	0.0731472707852778	T	T	T
0.4064372606721513	0.2735244157355103	0.0675174616807896	T	T	T
0.3417148966695805	0.4075960988051683	0.1222316678899378	T	T	T
0.4511505421048187	0.2497566322268729	0.1308769626171377	T	T	T
0.4787412885839090	0.0630154782565471	0.1386223522762275	T	T	T
0.2692908604285742	0.5769241289274563	0.1044072306532044	T	T	T
0.6939206134640103	0.4429096112145701	0.1543309299428866	T	T	T
0.4631755830909638	0.1735024405067388	0.1315380811248217	T	T	T
0.3875986915731852	0.9941017411068421	0.1214735993542263	T	T	T
0.5570983059035661	0.0716329560317130	0.1086466719121892	T	T	T
0.2957932252792642	0.5120577406433056	0.1139125810906019	T	T	T
0.3503321632113567	0.6512303436080369	0.1220585082952097	T	T	T
0.5526180324634302	0.3277232427899193	0.1436228356210002	T	T	T
0.6669630599805130	0.5042137679016390	0.1636338931159117	T	T	T

0.7496198681584455 0.4686726033618374 0.1141779784079085 T T T

OCCOH + CO = OCCOHC

IS

12.8516657480654999 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H  
75 3 6 7

Selective dynamics

Direct

0.06666666666666700	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.26666666666666586	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.46666666666666686	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.66666666666666643	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.86666666666666600	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.06666666666666700	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.26666666666666586	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.46666666666666686	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.66666666666666643	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.86666666666666600	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.06666666666666700	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.26666666666666586	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.46666666666666686	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.66666666666666643	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.86666666666666600	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.06666666666666700	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.26666666666666586	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.46666666666666686	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.66666666666666643	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.86666666666666600	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.06666666666666700	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.26666666666666586	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.46666666666666686	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.66666666666666643	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.86666666666666600	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1338547827370192	0.0675777979092735	0.9008312432136286	T	T	T
0.3342830515924472	0.0702675985429866	0.9013823922127816	T	T	T
0.5329761053679282	0.0675951366902616	0.8995363418775287	T	T	T
0.7329734991168924	0.0666259763255059	0.9000686406602322	T	T	T
0.9330771407317365	0.0657265039913936	0.8997278068645310	T	T	T
0.1336238900378526	0.2648672117052474	0.9008574935339756	T	T	T
0.3325503574956853	0.2679280849086736	0.9011387314856149	T	T	T
0.5315559335119333	0.2685157573750424	0.9025875650054379	T	T	T
0.7331755054451533	0.2668057683445865	0.8996832592690156	T	T	T
0.9339862201316825	0.2664713970477277	0.8997783646687478	T	T	T
0.1360268690445049	0.4667275290568592	0.9025126015995973	T	T	T
0.3349075718826747	0.4670057643217030	0.9005057953300105	T	T	T
0.5337852070332987	0.4676452283019018	0.9006171362426565	T	T	T
0.7332710963443025	0.4666906949953230	0.9000278002116413	T	T	T

0.9339290112023656	0.4667062911370403	0.8997283040977465	T	T	T
0.1347756610057678	0.6654380334304185	0.9017567481641812	T	T	T
0.3324742677540864	0.6660028417551895	0.9012009925370448	T	T	T
0.5361774679428380	0.6669306435235163	0.9006373360581631	T	T	T
0.7345978768470287	0.6667412579627247	0.8999721027532295	T	T	T
0.9326506005314270	0.6655817323124195	0.9007595884713859	T	T	T
0.1338357755213681	0.8664692090369437	0.8996976551306481	T	T	T
0.3334808249592593	0.8673454052199945	0.8996188124071507	T	T	T
0.5334004500633097	0.8669199775831009	0.8997049236420824	T	T	T
0.7337368768025093	0.8669231992872176	0.8997338984825027	T	T	T
0.9341944653700527	0.8661133694275842	0.8995480124642631	T	T	T
0.9965527597864744	0.9967917451265218	0.9969209578795240	T	T	T
0.1982682091787761	0.9966056244634489	0.9971768099149483	T	T	T
0.4000062479179378	0.0021463985144846	0.9966207996820948	T	T	T
0.5993794735019448	0.0016203499121902	0.9972549199408460	T	T	T
0.7987497923922862	0.0002295387678347	0.9973335362766662	T	T	T
0.9961500085480945	0.1967438712280447	0.9965954063283957	T	T	T
0.1903702260224573	0.1890945017200598	0.0036383983459560	T	T	T
0.3953745793071556	0.2060374181345642	0.0038301187772724	T	T	T
0.5986311817860897	0.2006392174269030	0.9965909945104914	T	T	T
0.7987223797363826	0.1994594622288412	0.9971877013812299	T	T	T
0.9986347493063246	0.3971144017117699	0.9958684463029920	T	T	T
0.2025434469523252	0.3929277477200355	0.9978943848627264	T	T	T
0.4087693523313544	0.4108456545793138	0.0003318816138305	T	T	T
0.6042953666744021	0.4030122143601599	0.0005071657411818	T	T	T
0.8015929748396704	0.3986043281720349	0.9966690220212392	T	T	T
0.0002561784914842	0.5993825798916562	0.9971047908351726	T	T	T
0.2018475771201119	0.5983873724665100	0.0037451879688981	T	T	T
0.4062023660597454	0.6057923261922949	0.9955915480266140	T	T	T
0.6064413772435154	0.6067213921146165	0.0015901218942137	T	T	T
0.8032798059298960	0.6012679962738678	0.0008941162320244	T	T	T
0.0006066972296277	0.7990478571849277	0.9971785034170910	T	T	T
0.2013663768868613	0.8008940309802485	0.9971374406461069	T	T	T
0.4018131718963193	0.8037799361021171	0.9965077479727983	T	T	T
0.6016980244832538	0.8031448488942855	0.9971922044125330	T	T	T
0.8023187066953895	0.8035135156543065	0.9966216086060989	T	T	T
0.2751940700319478	0.3427012400982907	0.0721932275778141	T	T	T
0.3314102238837000	0.2689691575865438	0.0746962540167075	T	T	T
0.6698545784627234	0.5371243448608314	0.0666770866333266	T	T	T
0.2438240098482698	0.3851911269847557	0.1171706565975741	T	T	T
0.3548153971119410	0.2471222473921200	0.1331766815691811	T	T	T
0.4938572816719700	0.1529870640529096	0.1478184385171663	T	T	T
0.2084149167271448	0.5718855670463430	0.1032896535813068	T	T	T
0.7206074494129834	0.3461340386671098	0.1643508782506416	T	T	T
0.6714967718652991	0.5338059615891542	0.1226653194457592	T	T	T
0.4053099844238373	0.2062933876465795	0.1346846030170273	T	T	T
0.5000847219034551	0.1093129467198723	0.1116391432666174	T	T	T
0.5773488306982831	0.2193633012236210	0.1560167720328493	T	T	T
0.2225275644452458	0.5025126073564229	0.1120070984766973	T	T	T

0.2733020447453759	0.6422001066926577	0.1238929149878452	T	T	T
0.7162287134647701	0.4199094686398904	0.1612593943032429	T	T	T
0.7747700230997788	0.3578573146883557	0.1989584140956322	T	T	T

TS

12.8516657480654999	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H  
75 3 6 7

Selective dynamics

Direct

0.0666666666666700	0.1333333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.2666666666666586	0.1333333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.4666666666666757	0.1333333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.6666666666666644	0.1333333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.8666666666666599	0.1333333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.0666666666666700	0.3333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.2666666666666586	0.3333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.4666666666666686	0.3333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.8666666666666671	0.3333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.0666666666666700	0.5333333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.2666666666666586	0.5333333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.4666666666666686	0.5333333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.6666666666666644	0.5333333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.8666666666666600	0.5333333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.0666666666666629	0.7333333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.2666666666666586	0.7333333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.4666666666666686	0.7333333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.6666666666666643	0.7333333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.8666666666666599	0.7333333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.0666666666666629	0.9333333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.2666666666666515	0.9333333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.4666666666666685	0.9333333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.6666666666666643	0.9333333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.8666666666666599	0.9333333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.1335939788101470	0.0672512936674017	0.899922591301179	T	T	T
0.3339612888792907	0.0703035570070837	0.9016460256767744	T	T	T
0.5327483445801448	0.0665002167149840	0.8990449793921614	T	T	T
0.7328972725931640	0.0669373002175908	0.9000119623463253	T	T	T
0.9328032451772553	0.0658489515465117	0.8995158996764526	T	T	T
0.1335881420160648	0.2654630175534808	0.9002855863064682	T	T	T
0.3341268643778557	0.2691067289243818	0.9035023507020522	T	T	T
0.5299605137457858	0.2660258697363911	0.9007896054190805	T	T	T
0.7327786558443249	0.2680941132316474	0.9014174404728567	T	T	T
0.9327217536791927	0.2663933083448121	0.8996213835534915	T	T	T
0.1358939342206429	0.4659881208114315	0.9028831083986079	T	T	T
0.3350230321390513	0.4673457126869802	0.9008115201880256	T	T	T
0.5321153485482403	0.4678504880794168	0.8999313653396425	T	T	T

0.7314052379514069	0.4645202216245949	0.9016282237138075	T	T	T
0.9315184441974678	0.4650878923637482	0.9013669816764059	T	T	T
0.13419906344445801	0.6639815639089065	0.9017187732023719	T	T	T
0.3313562428050915	0.6660123813141506	0.9009194696056840	T	T	T
0.5341293042478259	0.6683528531445705	0.8990911188169399	T	T	T
0.7342371373671721	0.6669514282729441	0.8989385725299951	T	T	T
0.9341378091664876	0.6659123123664376	0.8992691571653371	T	T	T
0.1336403269501866	0.8659721243749952	0.8995945301234370	T	T	T
0.3327092927948285	0.8668032822480612	0.8991856669477390	T	T	T
0.5331669115504087	0.8671808014542475	0.8997858327202041	T	T	T
0.7335765468531079	0.8669412597735142	0.8999252241420909	T	T	T
0.9336135097442695	0.8656980428411601	0.8995189093016692	T	T	T
0.9963741646121403	0.9964711568499908	0.9964005021391659	T	T	T
0.1973528834060653	0.9942654294659500	0.9966546293837438	T	T	T
0.3990192304656121	0.9989372803611811	0.9961098960142939	T	T	T
0.5993875350156076	0.0011378409510890	0.9974726710576352	T	T	T
0.7993069603250648	0.0004409449555177	0.9972836683592989	T	T	T
0.9972117484012571	0.1972490442671636	0.9960069832994340	T	T	T
0.1929782562501830	0.1889472152038812	0.0005242281249278	T	T	T
0.3927975887727643	0.1965986496518226	0.0083545751516647	T	T	T
0.5958053697414236	0.1967192101571300	0.9955877797610087	T	T	T
0.7988674754269950	0.1990204996237899	0.9969025334423988	T	T	T
0.9989548880336772	0.3965163799818183	0.9959820891506532	T	T	T
0.2057995351145215	0.3931050539685755	0.9983826279489930	T	T	T
0.4123076418704837	0.4215942674292871	0.0057109786417193	T	T	T
0.5959650884840688	0.4007720153868871	0.9962079794894210	T	T	T
0.7981831760925583	0.3996218286884381	0.0031125008822597	T	T	T
0.9997064851465937	0.5997050610384651	0.9965402226277321	T	T	T
0.2003557662146827	0.5970216145135785	0.0043041730677440	T	T	T
0.4057663322729690	0.6092175347311337	0.9952372377858613	T	T	T
0.6073073188618150	0.6099712579730657	0.9957057678922325	T	T	T
0.8016429794141766	0.6026823502798065	0.9955906408531172	T	T	T
0.9995652035920334	0.7984640494793231	0.9969439440631148	T	T	T
0.2001746831063941	0.7989884450505063	0.9970601342168811	T	T	T
0.4010157434511327	0.8035961846308322	0.9964395209438669	T	T	T
0.6020177507680556	0.8042693426887070	0.9973237066697687	T	T	T
0.8017953966255453	0.8021972373112309	0.9971889635160766	T	T	T
0.2773864925778236	0.3390456699746245	0.0754099148095410	T	T	T
0.3034408637754284	0.2408794467669831	0.0821245571261212	T	T	T
0.4847812290251083	0.3401971707861343	0.0712812667741019	T	T	T
0.2377851565389476	0.3778807332220882	0.1183026224583803	T	T	T
0.2778014720525709	0.1857374433433617	0.1381208001603664	T	T	T
0.3900685100537926	0.0582797706032360	0.1538180121843047	T	T	T
0.2096557042491491	0.5691033155189866	0.1039330953948193	T	T	T
0.7711176704356386	0.3977874806857050	0.1088018326501402	T	T	T
0.5296149495221811	0.3518534269021238	0.1230378858685207	T	T	T
0.3153835937209972	0.1336054508859563	0.1427974524067714	T	T	T
0.4005452255080550	0.0291063593378643	0.1128603036015150	T	T	T
0.4709549032198018	0.1195069707069863	0.1662882921266080	T	T	T

0.2214661378239210	0.4980941357356030	0.1123483406418218	T	T	T
0.2767110762069021	0.6385395030967010	0.1239559229712902	T	T	T
0.6935903856295962	0.3928603578381234	0.1188545747639543	T	T	T
0.8333224848154329	0.4718313995626477	0.1280574663259143	T	T	T

FS

12.8516657480654999	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710640	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu	C	O	H
75	3	6	7

Selective dynamics

Direct

0.0666666666666700	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.2666666666666586	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.4666666666666686	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.6666666666666643	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.8666666666666600	0.1333333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.0666666666666700	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.2666666666666586	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.4666666666666686	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.8666666666666600	0.3333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.0666666666666700	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.2666666666666586	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.4666666666666686	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.6666666666666643	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.8666666666666600	0.5333333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.0666666666666700	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.2666666666666586	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.4666666666666686	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.6666666666666643	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.8666666666666600	0.7333333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.0666666666666700	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.2666666666666586	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.4666666666666686	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.6666666666666643	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.8666666666666600	0.9333333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1349434612013471	0.0688157750638373	0.9012159366592991	T	T	T
0.3344452460916567	0.0691537939578934	0.9017656794936314	T	T	T
0.5326128593499898	0.0655166671883110	0.8992244874587401	T	T	T
0.7331711190735444	0.0662891316121170	0.8997483007757729	T	T	T
0.9332852286229547	0.0659467224682610	0.8996509097775822	T	T	T
0.1337627128089958	0.2664698274829108	0.9006529958905165	T	T	T
0.3341649100356010	0.2664072219086167	0.9010674081581868	T	T	T
0.5323029319158679	0.2662168449504361	0.9001024072020123	T	T	T
0.7339607833959976	0.2682040341380776	0.9011092028471585	T	T	T
0.9331885280002885	0.2666021487659784	0.8995694696620979	T	T	T
0.1342236772236798	0.4670654096110443	0.9018912034536980	T	T	T
0.3322929088706357	0.4654094392766581	0.9009867755602220	T	T	T



0.5312226422966576	0.4661055414540651	0.9003436249716035	T	T	T
0.7327390727824739	0.4656114056921088	0.9014889181158002	T	T	T
0.9310770617785799	0.4661072954265005	0.9013282755096625	T	T	T
0.1334388824949134	0.6650254159658200	0.9016090831079481	T	T	T
0.3309178862577883	0.6656229526993996	0.9009564227004052	T	T	T
0.5334233818192893	0.6669071167003389	0.8991752912043757	T	T	T
0.7333762694810354	0.6668210882413873	0.8993939808796576	T	T	T
0.9335289637293437	0.6670189712592510	0.8995905435866528	T	T	T
0.1335070419136196	0.8669015768134570	0.8998242554046465	T	T	T
0.3326267338037180	0.8665388646897656	0.8996588314926693	T	T	T
0.5327994474556644	0.8658992981979564	0.8996541886395232	T	T	T
0.7332409196540550	0.8663614496532692	0.8999054726293194	T	T	T
0.9336976037901552	0.8668411366687131	0.8997866007153877	T	T	T
0.0004008066760360	0.0000408984132252	0.9969670520523971	T	T	T
0.1997299103909849	0.9982063495970926	0.9975824541717569	T	T	T
0.3994558218161204	0.9975556177197064	0.9969469859301668	T	T	T
0.5998701369883094	0.9983832332411807	0.9970121807272482	T	T	T
0.7995450229720019	0.9986161909695479	0.9973124544858447	T	T	T
0.9955838452860217	0.1965614517728392	0.9958528593945216	T	T	T
0.2033348260791569	0.1993089553087365	0.0008349498935011	T	T	T
0.4045010492052077	0.1999535738561195	0.0043441853092661	T	T	T
0.5991536437207261	0.1951432900860060	0.9944785957489987	T	T	T
0.7988490206574970	0.1970104552682861	0.9966138446856713	T	T	T
0.9956294733495195	0.3978218647632209	0.9957141893233504	T	T	T
0.1945454695841662	0.3989652243014762	0.9982127934345466	T	T	T
0.4010193576624426	0.4018654253455039	0.0002786041462524	T	T	T
0.5981839564325617	0.4008436300208957	-0.0037396993283323	T	T	T
0.7969662111793283	0.3988577999743640	0.0037674213487760	T	T	T
-0.0016401848287308	0.6009802462917005	0.9967387817427564	T	T	T
0.1996962170497545	0.6011755219874110	0.0037058058382235	T	T	T
0.4038074016900912	0.6042620572951387	0.9950352950223935	T	T	T
0.6011305181235155	0.6022833203738883	0.9963198798528047	T	T	T
0.7999055718136286	0.6023464460827692	0.9964076912190425	T	T	T
-0.0001326896031681	0.8002676123038944	0.9971785583427736	T	T	T
0.1996274034718324	0.8005069189119884	0.9971122625792096	T	T	T
0.4008893762359258	0.8014435021172452	0.9966093141096375	T	T	T
0.6007046311572694	0.8006347714009820	0.9972126036919366	T	T	T
0.8006166003566689	0.8007058196786878	0.9971785920479429	T	T	T
0.2817764640818896	0.3197361571377798	0.0743455715308043	T	T	T
0.3532410806046196	0.2978869617464132	0.1174895403561653	T	T	T
0.4378825567911874	0.2654733646050548	0.0918771664002181	T	T	T
0.2149769058205221	0.3645640463839452	0.0918293908126864	T	T	T
0.3455448896999140	0.3184315875275828	0.1786577475696980	T	T	T
0.4705358256013207	0.2471074408905561	0.2504252227774016	T	T	T
0.2074351210967567	0.5740572588563301	0.1066157221056543	T	T	T
0.7588681877791940	0.3744167533518913	0.1047757881186919	T	T	T
0.5172117539734327	0.2626285801321964	0.1264968969604846	T	T	T
0.3924941399553863	0.2932835168590237	0.2067084829741871	T	T	T
0.4230149798645119	0.1657506960043485	0.2666717681845025	T	T	T

0.5018748113502965	0.2397155062563970	0.2089928289790415	T	T	T
0.2170145924671824	0.5024679350713583	0.1122616009979502	T	T	T
0.2786302466686474	0.6414628588656558	0.1251736258685726	T	T	T
0.6702874911818525	0.3316133986191473	0.1132683582759718	T	T	T
0.7930739879285179	0.4506739916761790	0.1271629698282720	T	T	T

## REFERENCES

- (1) Kresse, G.; Hafner, J. *Phys. Rev. B* **1993**, *47*, 558.
- (2) Kresse, G.; Furthmuller, J. *Comput. Mater. Sci.* **1996**, *6*, 15.
- (3) Kresse, G.; Furthmuller, J. *Phys. Rev. B* **1996**, *54*, 11169.
- (4) Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *77*, 3865.
- (5) Kresse, G.; Joubert, D. *Phys. Rev. B* **1999**, *59*, 1758.
- (6) Nie, X.; Esopi, M. R.; Janik, M. J.; Asthagiri, A. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 2459.
- (7) Henkelman, G.; Uberuaga, B. P.; Jónsson, H. *J. Chem. Phys.* **2000**, *113*, 9901.
- (8) Henkelman, G.; Jónsson, H. *J. Chem. Phys.* **1999**, *111*, 7010.
- (9) Bertie, J. E.; Whalley, E. *J. Chem. Phys.* **1967**, *46*, 1271.
- (10) Liu, H.; Wang, Y.; Bowman, J. M. *J. Phys. Chem. B* **2013**, *117*, 10046.
- (11) Sundararaman, R.; Goddard, W. A. *J. Chem. Phys.* **2015**, *142*, 064107.
- (12) Sundararaman, R.; Gunceler, D.; Letchworth-Weaver, K.; Schwarz, K. A.; Arias, T. A. *JDFTx*, **2012**, available from <http://jdfdx.sourceforge.net>.
- (13) Garrity, K. F.; Bennett, J. W.; Rabe, K. M.; Vanderbilt, D. *Comput. Mater. Sci.* **2014**, *81*, 446.
- (14) Letchworth-Weaver, K.; Arias, T. A. *Phys. Rev. B* **2012**, *86*, 075140.
- (15) Petrosyan, S. A.; Rigos, A. A.; Arias, T. A. *J. Phys. Chem. B* **2005**, *109*, 15436.
- (16) Arias, T. A.; Payne, M. C.; Joannopoulos, J. D. *Phys. Rev. Lett.* **1992**, *69*, 1077.
- (17) Freysoldt, C.; Boeck, S.; Neugebauer, J. *Phys. Rev. B* **2009**, *79*, 241103(R).
- (18) Kuhl, K. P.; Cave, E. R.; Abram, D. N.; Jaramillo, T. F. *Energy Environ. Sci.* **2012**, *5*, 7050.