

Supporting Information

Atomistic Mechanisms Underlying Selectivities in C₁ and C₂ Products from Electrochemical Reduction of CO on Cu(111)

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

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

E-mail: wag@wag.caltech.edu

1. Reaction Barriers and Energies for All C₁ Pathways

Table S1. Reaction barriers (ΔG^\ddagger) and energies (ΔG) for all C₁ pathways, with dependence of applied electrochemical potential U (vs SHE, from 0 to -1.2 V) and pH.

Reaction	ΔG^\ddagger (eV)	ΔG (eV)
$\text{CHOH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CH}_2\text{OH}_{\text{ad}}$	$0.5468 + 0.1863 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.4903 - 0.1003 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CHOH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CH}_{\text{ad}} \cdots \text{H}_2\text{O}$	$0.6667 - 0.0601 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.4806 - 0.0789 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CHOH}_{\text{ad}} + \text{H}^+ + \text{e}^- = \text{CH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}$	$0.6523 + 0.1237 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.3588 - 0.1926 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CHOH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{CH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$0.6813 - 0.0305 \times \text{U}$	$-0.0515 - 0.0244 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CH}_{2,\text{ad}}$	$0.4828 - 0.0362 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.4415 - 0.1450 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CH}_2\text{OH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CH}_{2,\text{ad}} \cdots \text{H}_2\text{O}$	$0.6550 + 0.0598 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.4838 + 0.1349 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CH}_2\text{OH}_{\text{ad}} + \text{H}^+ + \text{e}^- = \text{CH}_{2,\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}$	$0.6532 + 0.1295 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.3106 + 0.2453 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CH}_2\text{OH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{CH}_{2,\text{ad}} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$0.8691 + 0.1138 \times \text{U}$	$0.0072 + 0.0463 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CH}_2\text{OH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CH}_3\text{OH}$	$0.5787 - 0.0311 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.3498 + 0.5001 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CH}_{2,\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CH}_{3,\text{ad}}$	$0.1761 - 0.3116 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-1.0023 - 0.3527 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CH}_{3,\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CH}_4$	$1.1417 + 0.4065 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.2494 + 0.4565 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$

2. Reaction Barriers and Energies for All C₂ Pathways

Table S2. Reaction barriers (ΔG^\ddagger) and energies (ΔG) for all C₂ pathways, with dependence of applied electrochemical potential U (vs SHE, from 0 to -1.2 V) and pH.

Reaction	ΔG^\ddagger (eV)	ΔG (eV)
$\text{COCO}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{COHCOH}_{\text{ad}} + \text{OH}^-$	$0.0640 + 0.0458 \times \text{U}$	$0.1094 + 0.0432 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{COCO}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{OCC}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$0.8541 + 0.0226 \times \text{U}$	$-0.6017 - 0.1324 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{COCO}_{\text{ad}} + \text{CO}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{COCO}_{\text{ad}} + \text{CO}_{\text{ad}}$	$1.0334 + 0.0257 \times \text{U}$	$-0.1979 - 0.2618 \times \text{U}$
$\text{COHCOH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{COHCHOH}_{\text{ad}}$	$1.0118 + 0.1355 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.2896 + 0.0688 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{COHCOH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{HOCC}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$1.0027 + 0.0141 \times \text{U}$	$0.4615 + 0.0511 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{OCC}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{OCHC}_{\text{ad}}$	$1.2246 + 0.0097 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.3911 + 0.0352 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{OCC}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{OCCH}_{\text{ad}}$	$0.7080 - 0.0732 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.1478 - 0.0738 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCC}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{CC}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$1.2218 + 0.1038 \times \text{U}$	$-0.0964 + 0.2422 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCC}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCHC}_{\text{ad}}$	$0.6862 + 0.0214 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.5906 - 0.0365 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCC}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCCH}_{\text{ad}}$	$0.7444 - 0.0001 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.7280 - 0.0518 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCHC}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{CCH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$0.9864 + 0.1068 \times \text{U}$	$0.6405 + 0.4789 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCHC}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCH}_2\text{C}_{\text{ad}}$	$0.8962 - 0.0025 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.0633 + 0.0222 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCHC}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCHCH}_{\text{ad}}$	$0.7006 - 0.0124 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.2917 - 0.0249 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{OCCH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{OCCH}_2$	$0.7018 - 0.0027 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.0745 + 0.0253 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{OCCH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{HOCCH}_{\text{ad}} + \text{OH}^-$	$0.1022 + 0.0619 \times \text{U}$	$0.1753 + 0.0708 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCCH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{CCH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$1.1550 - 0.0072 \times \text{U}$	$-0.0211 - 0.3231 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCCH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCHCH}_{\text{ad}}$	$0.6542 - 0.0340 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.1558 - 0.0290 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCCH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCCH}_2\text{ad}$	$0.7211 - 0.0528 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.1512 - 0.0081 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCHCH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{CHCH}_{\text{ad}} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$1.2409 - 0.0516 \times \text{U}$	$-0.3029 - 0.4827 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCHCH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCHCH}_2\text{ad}$	$0.7281 - 0.0493 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.4719 - 0.0447 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCHCH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCH}_2\text{CH}_{\text{ad}}$	$0.8910 - 0.0233 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.0675 - 0.2519 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CCH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CCH}_2\text{ad}$	$0.7135 + 0.0069 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.2598 - 0.0273 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CCH}_{\text{ad}} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{CHCH}_{\text{ad}}$	$0.8516 - 0.0444 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$-0.4875 - 0.0176 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{CHCH}_{\text{ad}} = \text{CHCH}$	N/A	$0.6623 - 0.2781 \times \text{U}$
$\text{HOCHCH}_2\text{ad} + \text{H}_2\text{O}_{\text{ad}} + \text{e}^- = \text{CHCH}_2\text{ad} + \text{H}_2\text{O} + \text{OH}^-$	$1.6668 - 0.0519 \times \text{U}$	$-0.0574 - 0.4205 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCHCH}_2\text{ad} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCHCH}_3\text{ad}$	$0.5500 - 0.0525 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.3182 - 0.0195 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$
$\text{HOCHCH}_2\text{ad} + \text{H}_{\text{ad}} = \text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{ad}$	$0.7594 - 0.0060 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$	$0.1865 - 0.0075 \times \text{U} + 0.0592 \times \text{pH}$

$CCH_{2,ad} + H_{ad} = CHCH_{2,ad}$	$0.5494 - 0.0504 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.2473 - 0.0489 \times U + 0.0592 \times pH$
$CCH_{2,ad} + H_{ad} = CCH_{3,ad}$	$0.7762 - 0.0127 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.5671 - 0.3255 \times U + 0.0592 \times pH$
$HOCHCH_{3,ad} + H_{ad} = HOCH_2CH_3$	$-0.0430 - 0.1123 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.9103 + 0.0252 \times U + 0.0592 \times pH$
$CHCH_{2,ad} + H_{ad} = CH_2CH_2$	$0.7434 + 0.0452 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.5206 - 0.0060 \times U + 0.0592 \times pH$
$CHCH_{2,ad} + H_{ad} = CHCH_{3,ad}$	$0.2596 - 0.3034 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.0292 + 0.0133 \times U + 0.0592 \times pH$
$CHCH_{3,ad} + H_{ad} = CH_2CH_{3,ad}$	$0.4658 + 0.0144 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.5371 - 0.0147 \times U + 0.0592 \times pH$
$CHCH_{3,ad} = CH_2CH_2$	$0.8265 - 0.4491 \times U$	$-0.4914 - 0.0193 \times U$
$CH_2CH_{3,ad} = CH_2CH_2 + H_{ad}$	$0.5267 - 0.0511 \times U$	$0.1653 + 0.0036 \times U$
$CH_2CH_{3,ad} + H_{ad} = CH_3CH_3$	$0.4714 + 0.0085 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.8887 - 0.4449 \times U + 0.0592 \times pH$

3. Reaction Barriers and Energies for Pathways Unique to Electrochemical Reduction of Probe Molecules

Table S3. Reaction barriers (ΔG^\ddagger) and energies (ΔG) for pathways unique to electrochemical reduction of probe molecules, with dependence of applied electrochemical potential U (vs SHE, from 0 to -1.2 V) and pH . Note that the pathways converging with C_1 and C_2 pathways in CORR are not listed here, and please refer to Table S1 and S2.

Reaction	ΔG^\ddagger (eV)	ΔG (eV)
formaldehyde		
$HCHO + H_{ad} = CH_3O_{ad}$	$0.2058 + 0.0289 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.3834 + 0.0438 \times U + 0.0592 \times pH$
$CH_3O_{ad} + H_2O_{ad} + e^- = CH_3OH + OH^-$	$0.0267 - 0.0125 \times U$	$-0.1410 + 0.0404 \times U + 0.0592 \times pH$
$HCHO + H_2O_{ad} + e^- = CH_2OH_{ad} + OH^-$	$0.1602 + 0.0119 \times U$	$0.1989 + 0.0222 \times U + 0.0592 \times pH$
ketene		
$OCCH_2 + H_2O_{ad} + e^- = HOCCH_{2,ad} + OH^-$	$0.4416 - 0.0066 \times U$	$0.2355 + 0.0304 \times U + 0.0592 \times pH$
$HOCCH_{2,ad} + H_{ad} = HOCHCH_{2,ad}$	$0.4803 - 0.0599 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.7789 - 0.0657 \times U + 0.0592 \times pH$
$HOCCH_{2,ad} + H_{ad} = HOCCH_{3,ad}$	$0.6330 - 0.0480 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.2315 - 0.0880 \times U + 0.0592 \times pH$
$HOCCH_{2,ad} + H_2O_{ad} + e^- = CCH_{2,ad} + H_2O + OH^-$	$0.8626 - 0.0405 \times U$	$-0.5458 - 0.3719 \times U + 0.0592 \times pH$
acetylene		
$CHCH_{ad} + H_{ad} = CHCH_{2,ad}$	$0.6381 - 0.0722 \times U + 0.0592 \times pH$	$-0.0196 - 0.0587 \times U + 0.0592 \times pH$

APPENDIX

A1. Coordinates for all pathways in Table S1

$CHOH_{ad} + H_{ad} = CH_2OH_{ad}$

IS: structure01 + $1/2H_2$

structure01					
1.0000000000000000					
10.2813325984523996	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					
0.0833333333333357	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
0.1691731933365805	0.0867331570468368	0.9012190116961131	T	T	T
0.4159298818835784	0.0825710332879677	0.8992371729017075	T	T	T
0.6676829647463999	0.0842346448850919	0.8999495833950363	T	T	T
0.9174563324207290	0.0823263359231728	0.8993918302787387	T	T	T
0.1680243949136058	0.3340702685837208	0.9003922923139995	T	T	T
0.4160267379176362	0.3328857395073498	0.8993151647000933	T	T	T
0.6674565839977779	0.3340714935363669	0.8991838592445424	T	T	T
0.9170189082866640	0.3337880655019534	0.8998009685773652	T	T	T
0.1672624498607484	0.5831271018396428	0.9002326176335635	T	T	T
0.4180192607507299	0.5861704344070133	0.9010903669906619	T	T	T
0.6630122911328834	0.5810931209344085	0.9006349651231782	T	T	T
0.9166769604888773	0.5841266030050096	0.8994659545394758	T	T	T
0.1667462191211683	0.8330393435154332	0.8995622566059259	T	T	T
0.4186316722522392	0.8335764701119989	0.9016769454455976	T	T	T
0.6655879571588468	0.8325428038391228	0.9010714231601178	T	T	T
0.9172148529046792	0.8332635475517219	0.8994832958726876	T	T	T
0.0008531371950591	0.9996931393036148	0.9967332140813832	T	T	T
0.2504957081695549	0.9987226753740986	0.9969653200651635	T	T	T
0.5012171304108226	0.0015930086580937	0.9971484022497858	T	T	T
0.7520651093773384	0.0022242625778823	0.9961877563082271	T	T	T
0.9973420659195905	0.2479335585989329	0.9954962235810217	T	T	T

0.2501765191099357	0.2445473553682190	0.0038055545572990	T	T	T
0.5031107741552777	0.2475245442535933	0.9942344507055975	T	T	T
0.7509575414160421	0.2506218848845762	0.9974045600580603	T	T	T
0.9982409696662344	0.5005989335623112	0.9965851479331539	T	T	T
0.2505009169764648	0.5091963883745202	0.9964588891170493	T	T	T
0.4946468463636810	0.4966493243209006	0.9984013165232569	T	T	T
0.7493325038755427	0.4991871649944807	0.9962294253136816	T	T	T
0.9997978433748754	0.7493819691956929	0.9974215067809120	T	T	T
0.2489823352600987	0.7535365957747379	0.9973160256785393	T	T	T
0.5034733082634125	0.7540039457825963	0.0034498631171017	T	T	T
0.7527639668986469	0.7491086710885128	0.9956970334090908	T	T	T
0.3255124936880672	0.4105698638983565	0.0663570510900275	T	T	T
0.3931196096936960	0.4287271784455682	0.1236961119976466	T	T	T
0.5380311823965432	0.2778908502843334	0.1370846154364500	T	T	T
0.5431076303885882	0.7542656652514796	0.1106672015623277	T	T	T
0.4542791977534292	0.3757882732992116	0.1258143580673763	T	T	T
0.6275452624640646	0.3185523881127725	0.1099816955162237	T	T	T
0.4723867111990552	0.1782315682788619	0.1188795163821852	T	T	T
0.2366742246782297	0.4433080135207622	0.0769185375881301	T	T	T
0.4956857892327476	0.6500926794696187	0.1262807266915736	T	T	T
0.5003356696101793	0.8042042644103043	0.1349196586158466	T	T	T

TS: structure02

```

structure02
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168491      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

```

Cu      O      H
48      1      3      7
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
0.1683765408066664	0.0876311532022743	0.9015290431140967	T	T	T
0.4155668896940893	0.0834788465303524	0.8992215289001113	T	T	T
0.6666814128536261	0.0833270888912291	0.8999234232398805	T	T	T
0.9168493449963575	0.0832406660298529	0.8996877801892929	T	T	T
0.1673516554054440	0.3346135185053047	0.9009003998883048	T	T	T
0.4149952874384044	0.3341287513352361	0.9003016640657370	T	T	T
0.6659020132879728	0.3337565114522755	0.8992174211923468	T	T	T
0.9161004130719015	0.3341751984011331	0.8995642941199086	T	T	T
0.1646328046921012	0.5848441658690743	0.8990604898728386	T	T	T
0.4154886944380052	0.5838362685868942	0.8991286289946141	T	T	T
0.6612938153329071	0.5811239899937900	0.9014317605458891	T	T	T
0.9148884388283126	0.5843639653780213	0.8994313189773436	T	T	T
0.1652423302187851	0.8343541489841596	0.8995404125778361	T	T	T
0.4158986044559692	0.8327094054398768	0.9006255695651895	T	T	T
0.6645025427559790	0.8321072165554064	0.9007885097326742	T	T	T
0.9152528579108437	0.8333077760188199	0.8997851144656761	T	T	T
0.999341853559012	0.0013175979136243	0.9970547217888756	T	T	T
0.2482255567816358	0.9994341100820188	0.9970215895550623	T	T	T
0.4991872517004039	0.9990719053957160	0.9967131011932809	T	T	T
0.7487376310989172	0.0003163927740641	0.9969913945962807	T	T	T
0.9965930436744632	0.2492760670385300	0.9958587624261404	T	T	T
0.2513884698426493	0.2486625099602938	0.0042841262958696	T	T	T
0.5021618620483361	0.2466837083418054	0.9946619465105595	T	T	T
0.7498528602205164	0.2500107362705386	0.9969155178042785	T	T	T
0.9949667138262046	0.5013479204297937	0.9967896286650673	T	T	T
0.2421385090298389	0.5097984281663673	0.9939049242501218	T	T	T
0.4963322133024829	0.4960192253983252	0.0001834342533321	T	T	T
0.7484304174704169	0.4995850051167107	0.9964898739063077	T	T	T
0.9976655547976305	0.7512544214775027	0.9972825987461886	T	T	T
0.2467423637334150	0.7545253078155573	0.9973010832282394	T	T	T
0.4981398474443673	0.7497929888593621	0.0000956289488082	T	T	T
0.7500365560644658	0.7505381161520901	0.9969801661073732	T	T	T
0.3337536085374518	0.3999836288042673	0.0760924993329677	T	T	T
0.3974899997719208	0.3939398450115312	0.1309259337647841	T	T	T
0.5356098572779772	0.2350069806825636	0.1353342573840970	T	T	T
0.5694540240646295	0.7283627872085143	0.1504821900311245	T	T	T
0.4586558795941398	0.3417885613255386	0.1270006416451086	T	T	T
0.6276202275678653	0.2732160000411775	0.1100365192409223	T	T	T
0.4685605737457511	0.1366751393589763	0.1163368542419603	T	T	T
0.2426835289581207	0.4234939671080149	0.0891921603829250	T	T	T
0.5165064580370230	0.6206655504701123	0.1597965564915840	T	T	T
0.5456455546980008	0.7739826626909450	0.1853345624151387	T	T	T
0.4189188369021907	0.5672969101362213	0.0485564341259171	T	T	T

FS: structure03

```

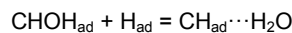
structure03
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000

```

```

-5.1406662992261998      8.9038952150168509      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
48      1      3      7
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
0.1685338090966672 0.0874111181462714 0.9008454165128637 T T T
0.4156341197907690 0.0827105665979053 0.8986850770602873 T T T
0.6656753248345894 0.0833188317259762 0.8997756864696931 T T T
0.9166068823590351 0.0827552111357013 0.8991430731517965 T T T
0.1660461184688242 0.3333655479190994 0.8990741991282793 T T T
0.4164543881069411 0.3347538402368605 0.9005203922255317 T T T
0.6676861040354696 0.3343550104864375 0.8989881750747329 T T T
0.9163480120825650 0.3338723427995001 0.8992960476137237 T T T
0.1684260605191121 0.5817352084809395 0.9009271768674896 T T T
0.4178026702682042 0.5852618515062845 0.9028718688782057 T T T
0.6652151450165750 0.5829905189569463 0.9003259833756042 T T T
0.9176291524658873 0.5846967507308403 0.8992185429157086 T T T
0.1668527257228474 0.8339403357255692 0.8990856064114863 T T T
0.4176192059145208 0.8330256595514273 0.9009947308457379 T T T
0.6658945224651892 0.8331168443484442 0.9007845889858739 T T T
0.9174713452977307 0.8337763284505050 0.8989674752803816 T T T
0.9997806497899088 0.9994944537733912 0.9958412079360406 T T T
0.2515242112181819 0.0021956149037850 0.9962784397841292 T T T
0.4997230657103484 0.0035084432474432 0.9966059880814782 T T T
0.7514652508946347 0.0031066726121596 0.9960429477267945 T T T
0.9934272865628530 0.2475042223495052 0.9947285453595014 T T T
0.2472397154708108 0.2527247833508871 0.0002153233113339 T T T
0.5019411850652097 0.2490378425149813 0.9941278812121218 T T T
0.7492830606280726 0.2507357577506424 0.9970434672699092 T T T
0.9990266218202296 0.5007943934465964 0.9963199371132986 T T T
0.2452594147317333 0.4937004900437044 0.9995384909652523 T T T
0.5084583468692969 0.5026481394087151 0.9987259826413269 T T T
0.7535228869956896 0.5008161990191210 0.9962173538148950 T T T
0.0021030237950963 0.7514806238733654 0.9966651216653321 T T T
0.2489054520688908 0.7504406267533433 0.9958345303126828 T T T
0.50232626472066147 0.7551178749973250 0.0009605573696485 T T T
0.7558673873991503 0.7521987156861141 0.9955538473417817 T T T
0.2780548060978343 0.3846938544119176 0.0827457717078280 T T T
0.4340924944079917 0.4643677021223326 0.1026076123874668 T T T
0.5022043301365975 0.2558200891657452 0.1404516530375737 T T T
0.5242580520824341 0.7594682710084356 0.1042093921282939 T T T
0.4623270251567780 0.3896635188398909 0.1190745804704333 T T T
0.6069791320100509 0.2934069279055612 0.1283024026827013 T T T
0.4468637925023969 0.1723789081779068 0.1106996212147186 T T T
0.2176934147290873 0.2739922795263080 0.1061123659157336 T T T
0.4950512059349899 0.6539024770051208 0.1148341384186824 T T T
0.4496042067918455 0.7796664960116660 0.1228971600399354 T T T
0.2243978182690146 0.4475061566027050 0.1009427127927274 T T T

```



IS: structure01 + 1/2H₂

TS: structure04

```

structure04
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168509      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
48      1      3      7
Selective dynamics
Direct
0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.3333333333333285 0.1666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.5833333333333356 0.1666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.8333333333333284 0.1666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.0833333333333358 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
0.8333333333333286 0.4166666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.3333333333333285 0.6666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.8333333333333286 0.6666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.0833333333333357 0.9166666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.3333333333333286 0.9166666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.5833333333333357 0.9166666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.8333333333333286 0.9166666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.1685338090966672 0.0874111181462714 0.9008454165128637 T T T
0.4156341197907690 0.0827105665979053 0.8986850770602873 T T T
0.6656753248345894 0.0833188317259762 0.8997756864696931 T T T
0.9166068823590351 0.0827552111357013 0.8991430731517965 T T T
0.1660461184688242 0.3333655479190994 0.8990741991282793 T T T
0.4164543881069411 0.3347538402368605 0.9005203922255317 T T T
0.6676861040354696 0.3343550104864375 0.8989881750747329 T T T
0.9163480120825650 0.3338723427995001 0.8992960476137237 T T T
0.1684260605191121 0.5817352084809395 0.9009271768674896 T T T
0.4178026702682042 0.5852618515062845 0.9028718688782057 T T T
0.6652151450165750 0.5829905189569463 0.9003259833756042 T T T
0.9176291524658873 0.5846967507308403 0.8992185429157086 T T T
0.1668527257228474 0.8339403357255692 0.8990856064114863 T T T
0.4176192059145208 0.8330256595514273 0.9009947308457379 T T T
0.6658945224651892 0.8331168443484442 0.9007845889858739 T T T
0.9174713452977307 0.8337763284505050 0.8989674752803816 T T T
0.9997806497899088 0.9994944537733912 0.9958412079360406 T T T
0.2515242112181819 0.0021956149037850 0.9962784397841292 T T T
0.4997230657103484 0.0035084432474432 0.9966059880814782 T T T
0.7514652508946347 0.0031066726121596 0.9960429477267945 T T T
0.9934272865628530 0.2475042223495052 0.9947285453595014 T T T
0.2472397154708108 0.2527247833508871 0.0002153233113339 T T T
0.5019411850652097 0.2490378425149813 0.9941278812121218 T T T
0.7492830606280726 0.2507357577506424 0.9970434672699092 T T T
0.9990266218202296 0.5007943934465964 0.9963199371132986 T T T
0.2452594147317333 0.4937004900437044 0.9995384909652523 T T T
0.5084583468692969 0.5026481394087151 0.9987259826413269 T T T
0.7535228869956896 0.5008161990191210 0.9962173538148950 T T T
0.0021030237950963 0.7514806238733654 0.9966651216653321 T T T
0.2489054520688908 0.7504406267533433 0.9958345303126828 T T T
0.50232626472066147 0.7551178749973250 0.0009605573696485 T T T
0.7558673873991503 0.7521987156861141 0.9955538473417817 T T T
0.2780548060978343 0.3846938544119176 0.0827457717078280 T T T
0.4340924944079917 0.4643677021223326 0.1026076123874668 T T T
0.5022043301365975 0.2558200891657452 0.1404516530375737 T T T
0.5242580520824341 0.7594682710084356 0.1042093921282939 T T T
0.4623270251567780 0.3896635188398909 0.1190745804704333 T T T
0.6069791320100509 0.2934069279055612 0.1283024026827013 T T T
0.4468637925023969 0.1723789081779068 0.1106996212147186 T T T
0.2176934147290873 0.2739922795263080 0.1061123659157336 T T T
0.4950512059349899 0.6539024770051208 0.1148341384186824 T T T
0.4496042067918455 0.7796664960116660 0.1228971600399354 T T T
0.2243978182690146 0.4475061566027050 0.1009427127927274 T T T

```

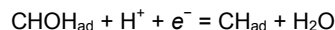
0.5833333333333357	0.9166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333286	0.9166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.1688024393569436	0.0860170433525730	0.9015641742202473	T	T	T
0.4157300388691926	0.0820594161596078	0.8995359981427975	T	T	T
0.6673845688289637	0.0829529277574087	0.9005318363408638	T	T	T
0.9171868565189736	0.0818979648165042	0.9001109544771596	T	T	T
0.1673669373398356	0.3331133168193043	0.9011507737497741	T	T	T
0.4164764526213656	0.3329182227399989	0.9002441060635090	T	T	T
0.6674244802542784	0.3331178616733320	0.8995025625966834	T	T	T
0.9174560244687988	0.3335574578461193	0.9001967260819457	T	T	T
0.1670699696588664	0.5819813565721158	0.9009423784812448	T	T	T
0.4168230519540659	0.5836674979595107	0.8997542674875442	T	T	T
0.6638966239527349	0.5806744599153723	0.9007992572622745	T	T	T
0.9170941835779345	0.5830237472539995	0.8996821434076817	T	T	T
0.1664240114551197	0.8324055100913184	0.8996452859331505	T	T	T
0.4176397510583845	0.8329319673096042	0.9006874768505994	T	T	T
0.6671387907496418	0.8330140525758540	0.8993599303391651	T	T	T
0.9157088590135660	0.8316124298819959	0.9002269545595043	T	T	T
0.0000974041541434	0.9975288858442619	0.9973501423711055	T	T	T
0.2501421613273264	0.9967949463889525	0.9972736943613130	T	T	T
0.5003638915846850	0.9984032656732974	0.9982075040964002	T	T	T
0.7498723085600185	0.9982013890707205	0.9979910376494368	T	T	T
0.99592444898349805	0.2461420297361653	0.9965419521192697	T	T	T
0.2494943106269986	0.2433385483382483	0.0039674159315333	T	T	T
0.5028718194731006	0.2458453027636110	0.9946064509100617	T	T	T
0.7506968308588471	0.2484934417615850	0.9979499333970687	T	T	T
0.9984790136292054	0.4991614305110638	0.9972141947444050	T	T	T
0.2514130196750791	0.5078328803455519	0.9979635342414093	T	T	T
0.49515991250602071	0.4982110793975993	0.9999128887595521	T	T	T
0.7489859443670337	0.4976819053880802	0.9964529194086094	T	T	T
0.9990451193765895	0.7480421732079076	0.9970416819308678	T	T	T
0.250926358771815	0.7519332895835090	0.9975074500014545	T	T	T
0.5056950482032548	0.7520579513033872	0.9989059906373798	T	T	T
0.7475520485846716	0.7474560551928170	0.9984263155478642	T	T	T
0.3260059779921481	0.4038789191040121	0.0678647517159919	T	T	T
0.4007065579013271	0.4162885266765483	0.1244296892639857	T	T	T
0.5052573135461363	0.2293501782940980	0.1353172885518878	T	T	T
0.6101788787556952	0.7030297580571635	0.1305843141416405	T	T	T
0.4466642905719561	0.3483880307851068	0.1249946008686083	T	T	T
0.5967826721445677	0.2606380774726403	0.1103044886961913	T	T	T
0.4315131263654121	0.1361544049751965	0.1142029858001502	T	T	T
0.2423406901795999	0.4398433339766911	0.0816501791739848	T	T	T
0.5270884387018910	0.5930309872240358	0.1345171470649205	T	T	T
0.5691035661319379	0.7661219121145431	0.1445527496657015	T	T	T
0.6249304059898564	0.7222594316907952	0.0704940272205190	T	T	T

```

FS: structure05
    structure05
      1.0000000000000000
      10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
      -5.1406662992261998      8.9038952150168509      0.0000000000000000
      0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
    Cu      C      O      H
    48      1      3      7
  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
0.1686937658785183 0.0859731180634458 0.9016953003498389 T T T
0.4160633020297140 0.0827329258037486 0.8993939203865844 T T T
0.6681408197501946 0.0835011705974008 0.9003226611436588 T T T
0.9179483415877716 0.0825739625285626 0.9000066228858523 T T T
0.1681338447428235 0.3339894173982025 0.9015468250654919 T T T
0.4159707971182586 0.3332025984980797 0.9000905564422989 T T T
0.6675849812777896 0.3339985258013136 0.8994380565715657 T T T
0.9175937415288565 0.3338618111970420 0.8999866959740196 T T T
0.1676131302890034 0.5826145137716153 0.9008905031517445 T T T
0.4166723401698318 0.5836230897463967 0.8996627210445730 T T T
0.6626015553568663 0.5806186195810394 0.9011328104578457 T T T
0.9169051240846871 0.5834100429101654 0.8997269415564955 T T T
0.1664265618079254 0.8324958470973358 0.8998237958541087 T T T
0.4170706865327578 0.8335376951319956 0.9002065659930159 T T T
0.6668945103943730 0.8325639890872004 0.8996653158256612 T T T
0.9169792754305683 0.8324890281525079 0.8996053504134673 T T T
-0.0005468484521505 0.9971352253960662 0.9974972866862235 T T T
0.2506133902140811 0.9965084982101757 0.9974846426149877 T T T
0.5016718331959119 -0.0000993920747645 0.9979794729273773 T T T
0.7508844646869515 -0.0010024426614120 0.9978754295701013 T T T
-0.0028723171853844 0.2471559598829305 0.9961883470808671 T T T
0.2504497045928854 0.2406552652485265 0.0040758893850929 T T T
0.5038538556047305 0.2463238605813807 0.9943700553393354 T T T

```

0.7515151982402190	0.2499718485979071	0.9979130823428370	T	T	T
-0.0005583860651569	0.5000656056972540	0.9971463594663421	T	T	T
0.2532686751782043	0.5106736483237766	0.9983113582838219	T	T	T
0.4960785330402336	0.5009482134877453	0.0004748960291668	T	T	T
0.7491389973560582	0.4989187793133208	0.9968769339352623	T	T	T
-0.0007661119205839	0.7485618863800376	0.9976780606001499	T	T	T
0.2501343837508571	0.7526748594321538	0.9978091284305326	T	T	T
0.5044160635663383	0.7549124106870688	0.9972841519344380	T	T	T
0.7506434263382631	0.7489046918538397	0.9966223865598745	T	T	T
0.3326581552704744	0.4042240030897051	0.0658966949668674	T	T	T
0.4063865935625952	0.4081649549845486	0.1277287936764207	T	T	T
0.5004966076702793	0.2225726562745629	0.1351452391618079	T	T	T
0.6125493334064380	0.6761275904358409	0.1480439673359840	T	T	T
0.4491424408058084	0.3338415666626730	0.1285858430873942	T	T	T
0.5936644300204671	0.2580120722881272	0.1105473651879609	T	T	T
0.4282820079232890	0.1327834869862286	0.1112708079609413	T	T	T
0.2421525021964203	0.4260244009345387	0.0830901538258510	T	T	T
0.4910827554713725	0.5193568187040883	0.1379732887103105	T	T	T
0.5785312461981302	0.7430986521838321	0.1639619291653734	T	T	T
0.6532139943823362	0.7150931739135683	0.1054279139116747	T	T	T



IS: structure06

```

structure06
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168509      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
48      1      7      15

```

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
0.1685797443041512	0.0874454854758210	0.9016820796882946	T	T	T
0.4152754250354490	0.0828891686791918	0.8995174039887724	T	T	T
0.6668741959803480	0.0838564896548193	0.9005412594348174	T	T	T
0.9171961564275898	0.0836240715907213	0.8998737707328451	T	T	T
0.1675843224337954	0.3340943924913561	0.9012183119805725	T	T	T
0.4158263210633990	0.3335060776526281	0.9001811450179377	T	T	T
0.6669499619718726	0.3342237905322487	0.8993621206526339	T	T	T
0.9166994297320716	0.3337220842366408	0.9001309711237312	T	T	T
0.1668850620979110	0.5828273931412644	0.9006128264375317	T	T	T
0.4159743329994079	0.5831827626441746	0.9004227887745937	T	T	T
0.6622599259128369	0.5811945229213523	0.9013602365774699	T	T	T
0.9165508977917618	0.5839604539250953	0.8994380188143964	T	T	T
0.1656369303431278	0.8331415341939356	0.8997431324161245	T	T	T
0.4163706354145169	0.8340013207938362	0.9001478880609920	T	T	T
0.6659812780145358	0.8329230339325568	0.8997957902201942	T	T	T
0.9162460117623301	0.8333108313850843	0.8997180302307212	T	T	T
-0.0008191716453543	-0.0005053195051019	0.9973359103286910	T	T	T
0.2493735846332124	-0.0013013601432655	0.9973648220657533	T	T	T
0.4998036710251779	0.0004745319105111	0.9987419324550429	T	T	T
0.749737334167914	-0.0001473306771796	0.9977310356284164	T	T	T
-0.0041382918212087	0.2480356584478294	0.9969693911473960	T	T	T
0.2497413723412165	0.2467951673038144	0.0045670650853071	T	T	T
0.5021962075758167	0.2470625407740055	0.9945171440023749	T	T	T
0.7498647882696178	0.2505682824335074	0.9985095081630800	T	T	T
-0.0023748765488971	0.5007513039276237	0.9974752595346155	T	T	T
0.2490502393316959	0.5082625208680706	0.9977163855602279	T	T	T
0.4970164771513955	0.5007991393632508	0.0015034389005411	T	T	T
0.7493426629443162	0.4996420604667951	0.9966820589634269	T	T	T
-0.0015709151747223	0.7493894507010433	0.9980357098196768	T	T	T
0.2487187384017277	0.7531356898165642	0.9980328481548799	T	T	T
0.5017424751550720	0.7543080879268634	0.9972229831427917	T	T	T
0.7500706108713022	0.7502223824573117	0.9969523882178493	T	T	T
0.3352568853611564	0.4095267591510851	0.0696496314587896	T	T	T
0.3926942895480249	0.4061392397621073	0.1276040267050132	T	T	T
0.537380516451139	0.2516554681030503	0.1417684951321464	T	T	T
0.5479817899964495	0.7121363985274646	0.1721171301491977	T	T	T
0.8578721222478216	0.4786870432833717	0.1477875485449032	T	T	T
0.2769937697166441	0.9172749252689585	0.1519369583271612	T	T	T
0.8374330559720329	0.8766476247127367	0.14924407445592763	T	T	T
0.9924984268562503	0.7737448198109721	0.1848886487399476	T	T	T
0.4507879255681774	0.3503674957067388	0.1273745270201179	T	T	T
0.6421903227446478	0.3242008777658243	0.1538391234660716	T	T	T
0.5489889275789868	0.2166057429638719	0.0997173089714437	T	T	T
0.2562790077840795	0.4529966035756939	0.0814870359965990	T	T	T
0.4956007590241114	0.6058022383991727	0.1587362346536914	T	T	T

0.4941234889864697	0.7566599568948569	0.1520514962728212	T	T	T
0.7251617840209665	0.8098816588626984	0.1578489433225233	T	T	T
0.8478672830744099	0.8966872319808353	0.1033756326485394	T	T	T
0.9181394772974060	0.8224435908613263	0.1665062001835544	T	T	T
0.9497082949389292	0.6667383205042182	0.1711817089641297	T	T	T
0.1029102582007072	0.8346616130375419	0.1718414931703381	T	T	T
0.8621812111121565	0.4824657611048638	0.1007619650337308	T	T	T
0.9149091404371860	0.4294107009384466	0.1590577430522201	T	T	T
0.2850033907292272	0.9138817220440623	0.1056427033440556	T	T	T
0.3482075487186999	0.0218970216637766	0.1632780758925721	T	T	T

TS: structure07
 structure07
 1.000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -5.1406662992261998 8.9038952150168491 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H
 48 1 7 15

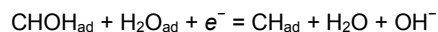
Selective dynamics

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
0.1688391796314436	0.0861943273364836	0.9006021020846897	T	T	T
0.4160001881893303	0.0824830220571378	0.8989304761150330	T	T	T
0.6671122466686634	0.0837798908950457	0.9001727149362103	T	T	T
0.9179114981796866	0.0838500421078471	0.8996382532953164	T	T	T
0.1685322717788215	0.3343643041227911	0.9005359789103580	T	T	T
0.4181899586080288	0.3347530924941244	0.9004222358825759	T	T	T
0.6681473705351904	0.3339509971635283	0.8989843837513909	T	T	T
0.9176650796613499	0.3339253163249010	0.8996265728092019	T	T	T
0.1688979586972972	0.5823692666055852	0.9007399177587520	T	T	T
0.4184971835701721	0.5841618644601564	0.9009510519097416	T	T	T
0.6631284279130090	0.5815879826860045	0.9018179151786354	T	T	T
0.9169654337881586	0.5840734535399743	0.8993136651806376	T	T	T
0.1656783789132779	0.8327576766914351	0.8994821607260834	T	T	T
0.4167038530996345	0.8336060730784576	0.8995344827679634	T	T	T
0.6679091530363427	0.8341489921047101	0.8996293273379938	T	T	T
0.9166167060225124	0.8326143550750629	0.8994711711520930	T	T	T
0.9998348183212417	0.9988328337319177	0.9963359615177471	T	T	T
0.2512063759012003	0.9977251701910311	0.9967585915617704	T	T	T
0.5019327970274418	0.0017455001118468	0.9976245468033054	T	T	T
0.7518564751943841	0.0017399516681767	0.9970494170825591	T	T	T
0.9992817729157178	0.2499071413376482	0.9962333238344934	T	T	T
0.2509921109941332	0.2417453365006051	0.0009980058891847	T	T	T
0.5029302382390380	0.2469342583246444	0.9940313857145689	T	T	T
0.7515144353127979	0.2507749050918393	0.9975116605107399	T	T	T
0.9998713033875690	0.5006571276564321	0.9966406587988363	T	T	T
0.2517714117523288	0.5091752846666525	0.0017496995457032	T	T	T
0.5002288131516188	0.5004055049749964	0.0030504401008914	T	T	T
0.7524738605140844	0.4996830261470217	0.9959419579576723	T	T	T
0.0003176605068287	0.7497628864039697	0.9976149607623060	T	T	T
0.2508843595176829	0.7529450510962836	0.9966015103836408	T	T	T
0.5031164804938045	0.7565077324711930	0.9958954454054552	T	T	T
0.7524182476747754	0.7524886625540083	0.9963188148959894	T	T	T
0.2981045671011963	0.3976421402296799	0.0615542336879153	T	T	T
0.4806983289366391	0.4831510852011781	0.1058914677729649	T	T	T
0.5314895815527748	0.2621147198303636	0.1477182822659743	T	T	T
0.5438520455656419	0.7048544063896036	0.1724087306335966	T	T	T
0.8495712106661751	0.4391116587613521	0.1526383287864141	T	T	T
0.3207524271756673	0.9049684029978016	0.1559363019267508	T	T	T
0.8316009355359468	0.8837243653259695	0.1543681265037509	T	T	T
0.0051726503690551	0.7651875327311576	0.1847376199374735	T	T	T
0.4915340755574138	0.4011104421772784	0.1269988020854594	T	T	T
0.6405501847268994	0.3188618922194466	0.1577260189032564	T	T	T
0.5297892712544825	0.2214282234067539	0.1054588613080445	T	T	T
0.2348366443938505	0.3661380122032430	0.1058215632495659	T	T	T
0.5015506893811982	0.5773312782814657	0.1356827329488413	T	T	T
0.4895484459289764	0.7590048436778831	0.1657386366692508	T	T	T
0.6563241496395874	0.7786758001142371	0.1662192723808646	T	T	T
0.8508546045840828	0.9105140956083519	0.1097532496885411	T	T	T
0.8985006183600837	0.8415540050122617	0.1654920261443622	T	T	T
0.9618754728068679	0.6577656732388716	0.1757322731843124	T	T	T
0.1139254850941725	0.8137355503663609	0.1757913491688007	T	T	T
0.8645728237931615	0.4436475942552724	0.1065059519521685	T	T	T
0.8995829295493935	0.3860879383587077	0.1683005140681529	T	T	T
0.3230504884055308	0.9077396451691863	0.1096792686891088	T	T	T
0.3795269579608926	0.0109266308512538	0.1682739932890202	T	T	T

FS: structure08
 structure08
 1.000000000000000

10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000			
-5.1406662992261998	8.9038952150168509	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	O	H		
48	1	7	15		
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
0.1668577690952648	0.0836074330249495	0.8996400488650376	T	T	T
0.4156841114421616	0.0835881281725435	0.8990352808219352	T	T	T
0.6676977226860806	0.0843904442247542	0.8999703565662345	T	T	T
0.9177522357451577	0.0843339639965903	0.8997965060546776	T	T	T
0.1671215553868328	0.3338950689820475	0.9000302889528115	T	T	T
0.4155081606040874	0.3350964841187696	0.9019088369745838	T	T	T
0.6674375688564592	0.3342613893866234	0.8985355324086052	T	T	T
0.9182507745973876	0.3328055178168386	0.9003025200908418	T	T	T
0.1670621403956967	0.5835623647904865	0.8997799661720886	T	T	T
0.4183016212088592	0.5828323317699566	0.9023284644524192	T	T	T
0.6639086499409019	0.5815181485459324	0.9016817199870001	T	T	T
0.9167752284094148	0.5847428603485885	0.8993951704555226	T	T	T
0.1657137580669736	0.8330031045866518	0.9001921671874989	T	T	T
0.4174580572936438	0.8338269854729020	0.8995456313963371	T	T	T
0.6677641457830777	0.8336980298468729	0.9000753434285754	T	T	T
0.9181270276690158	0.8353652723214947	0.9008944806532758	T	T	T
-0.0033049296665413	-0.0065099976371821	0.0010029608356772	T	T	T
0.2523543474331428	-0.0004829080183662	0.9969481078675487	T	T	T
0.5008294574422893	0.0016353017745572	0.9970030260785135	T	T	T
0.7491670248402970	0.0010124734317243	0.9970317944494211	T	T	T
-0.0033912965625589	0.2563618875079106	0.0022129223627380	T	T	T
0.2532585110018076	0.2498001620843007	-0.0003643539394227	T	T	T
0.5030193486954820	0.2490649348601955	0.9937641254450807	T	T	T
0.7497452587058240	0.2521517357798847	0.9967735294138642	T	T	T
-0.0005120458650517	0.5025279555009042	0.9963243335151016	T	T	T
0.2486397252718709	0.5030165983396218	-0.0031227625962515	T	T	T
0.5030013491904056	0.5020958986777375	0.0045428638003774	T	T	T
0.7521122930627210	0.4994701815862601	0.9968169902948706	T	T	T
-0.0004514510067766	0.7482315102784337	-0.0020341346671576	T	T	T
0.2511401738165179	0.7512615379692391	0.9965223015712348	T	T	T
0.5011109047011125	0.7548152641103951	0.9969161263809664	T	T	T
0.7507238448632514	0.7505771871703968	0.9962817506542112	T	T	T
0.0814537143450375	0.1663226958976098	0.0534211889017554	T	T	T
0.4780518217764518	0.4841190427448572	0.1002631545504221	T	T	T
0.5399485918732267	0.2551143835804349	0.1465706649764570	T	T	T
0.5572379477355999	0.7230300551065393	0.1684313027219368	T	T	T
0.8646666314137910	0.4217187523753850	0.1544398602775929	T	T	T
0.3557875256364028	0.8926774091438591	0.1562636517888346	T	T	T
0.8593714465924867	0.8994931892181631	0.1613573376081561	T	T	T
0.0254455752008721	0.7548282146153604	0.1561440220064104	T	T	T
0.5009484014738190	0.4131227750193991	0.1223055572806139	T	T	T
0.6478704711091683	0.3085428690034971	0.1578042943519524	T	T	T
0.5400583518464214	0.2196490177330802	0.1035271808984630	T	T	T
0.0927049086190584	0.1740446322807472	0.1049048633361650	T	T	T
0.5089757804160415	0.5774377445376291	0.1271035487071148	T	T	T
0.5052620082006225	0.7808154909524614	0.1691012708545928	T	T	T
0.6684309220132907	0.7948682956734570	0.1673066612523167	T	T	T
0.8872739040808980	0.9488364416260624	0.1202879852102977	T	T	T
0.9175756762286279	0.8459938874246343	0.1641450123012946	T	T	T
0.9792820521413456	0.6457989170442303	0.1618413674255401	T	T	T
0.1345831954194070	0.7987447274420423	0.1621193605623026	T	T	T
0.8798266788773912	0.4136234421879606	0.1090594004777675	T	T	T
0.9136180141761534	0.3728196396504592	0.1750897715016061	T	T	T
0.3638596991673582	0.8917434707543559	0.1101878762852530	T	T	T
0.4063722813907955	0.0000791532637898	0.1668237688293134	T	T	T



IS: structure09

structure09					
1.0000000000000000					
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000			
-5.1406662992261998	8.9038952150168509	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	O	H		
48	1	4	8		
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
0.1685339705317360	0.0863170759404368	0.9012511532262946	T	T	T
0.4155627892930605	0.0825247915785063	0.8990709532704395	T	T	T
0.6667487200458209	0.0835124207706121	0.8992427461009959	T	T	T
0.9177125092392370	0.0828379940177126	0.8993534415937029	T	T	T
0.1677657315910795	0.3337905246105594	0.9009051297643094	T	T	T
0.4160205734255964	0.3326495190826897	0.8992482993420474	T	T	T
0.6669094861711091	0.3337869599724922	0.8990207658647960	T	T	T
0.9164717700101050	0.3332583094288282	0.8999063906197956	T	T	T
0.1670986145045235	0.5828145054861353	0.9006492313207800	T	T	T
0.4162011020016372	0.5837941514387496	0.8996542408698969	T	T	T
0.6638149912501000	0.5828417130134730	0.9026278129976577	T	T	T
0.9166332732106175	0.5837331629217261	0.8995136710415446	T	T	T
0.1653593219387292	0.8328660996942817	0.8995199250393354	T	T	T
0.4165962044582523	0.8345419490759860	0.8993627989380485	T	T	T
0.6673929371258454	0.8317365007591725	0.9008480537847380	T	T	T
0.9130173206186520	0.8307466702034786	0.9019606812061114	T	T	T
0.0009758642109849	0.0007100274464234	0.9967506763030105	T	T	T
0.2497241512082473	0.9987470242883354	0.9967469082833975	T	T	T
0.5005333627030961	0.9999281613789225	0.9969551306091944	T	T	T
0.7504506562396126	0.0023478393197645	0.9950789522254363	T	T	T
-0.0025237629773403	0.2482750211562639	0.9964548334202028	T	T	T
0.2488337799763297	0.2464371289351378	0.0041439625378054	T	T	T
0.5024159184572623	0.2467168332024779	0.9938543844468661	T	T	T
0.7503696072585890	0.2488874281475263	0.9974119585230495	T	T	T
-0.0011530863139312	0.4998323769622874	0.9969866043219621	T	T	T
0.2501399298075712	0.5070583998752066	0.9978206219616590	T	T	T
0.4929644406886073	0.4954857447609151	0.9979556811817791	T	T	T
0.7501609965859527	0.4964108818046581	0.9957816381028373	T	T	T
0.0001052544379328	0.7486624960723064	0.9973056143239796	T	T	T
0.2491269957782600	0.7528725318148414	0.9973414470839371	T	T	T
0.4988043903966609	0.7533443012976663	0.9956193993576973	T	T	T
0.7478996725641757	0.7478766495055184	0.0044576190400094	T	T	T
0.3345909734780376	0.4098728507722047	0.0687853884418997	T	T	T
0.4013369793793712	0.4094751106138645	0.1241041276148961	T	T	T
0.5009340587780794	0.2162000748376070	0.1343822545081102	T	T	T
0.7124539983320036	0.7276725931051580	0.1053554426923393	T	T	T
0.6509781647669594	0.9432946242241369	0.1460890284412119	T	T	T
0.4450723466674687	0.3402630146441284	0.1231422839301902	T	T	T
0.6036005749752970	0.2556634701052980	0.1185919125768080	T	T	T
0.4405125723705517	0.1337906157066245	0.1047696944936625	T	T	T
0.2609122881095478	0.4583981103628656	0.0825653723189002	T	T	T
0.6250016007623003	0.6306835086543581	0.1163829430386334	T	T	T
0.6903152341468473	0.8051656375693279	0.1228052852726304	T	T	T
0.5569603911401514	0.9109937412518918	0.1684609623835027	T	T	T
0.6392083890895675	0.9837315398410371	0.1057731412038090	T	T	T

TS: structure10
 structure10
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -5.1406662992261998 8.9038952150168491 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H

48 1 4 8

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
0.8333333333333286	0.4166666666666714	0.8029049805823975	F	F	F
0.0833333333333357	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333286	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333357	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333286	0.6666666666666645	0.8029049805823975	F	F	F
0.0833333333333359	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333286	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333359	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333286	0.9166666666666717	0.8029049805823975	F	F	F
0.1681864663810693	0.0852561008332859	0.8999729295395447	T	T	T
0.4151368023306234	0.0819854894807861	0.8989097717836566	T	T	T
0.6656851218914610	0.0833603015815549	0.8991481820362489	T	T	T
0.9181421457818462	0.0843710333531160	0.8995693276596509	T	T	T
0.1685462666222730	0.3340629544473978	0.8999702351076710	T	T	T
0.4188699744126162	0.3351141123714959	0.9009461448077069	T	T	T
0.6675589146268183	0.3339540860148997	0.8993099428453785	T	T	T
0.9175491848290187	0.3335103469608802	0.8998835767397251	T	T	T
0.1679674308686897	0.5820880233369882	0.9004069351265377	T	T	T
0.4191991170640615	0.5831492433948684	0.9012095356889325	T	T	T

0.6632258280086404	0.5836419470276433	0.9046575138263744	T	T	T
0.9154902766028487	0.5833651154016863	0.8994407821898481	T	T	T
0.1645773602864548	0.8321400699594235	0.8990963952675121	T	T	T
0.4157044108848496	0.8325614609804158	0.8992120444122433	T	T	T
0.6686342832533816	0.8335572627308236	0.9008402604133526	T	T	T
0.9125385696414886	0.8304585541369133	0.9013861734491732	T	T	T
0.0013469361270521	0.0008864857125540	0.9954289455693526	T	T	T
0.2495838118573936	0.9969922389009810	0.9961618372215978	T	T	T
0.5003407113385427	-0.0001500376308141	0.9967447242686197	T	T	T
0.7509564141520459	0.0049329867440067	0.9951360675517542	T	T	T
-0.0005137068665759	0.2503643674599181	0.9964814491233687	T	T	T
0.2465575221416919	0.2397553358826603	0.0006444299236395	T	T	T
0.5014832763531784	0.2440303776388411	0.9946801103915851	T	T	T
0.7510803385911234	0.2496418922607242	0.9968198680353507	T	T	T
-0.0003939784410837	0.5001878604920178	0.9964984001961165	T	T	T
0.2503068129929831	0.5078824990051870	0.0002549732641260	T	T	T
0.4972887392976110	0.4941916574531047	0.0058856760855871	T	T	T
0.7522486216166537	0.4976704873150790	0.9960145218681601	T	T	T
0.0016734244691973	0.7491228620098070	0.9968374372206957	T	T	T
0.2496933611194207	0.7522070852424596	0.9966025085871710	T	T	T
0.4995788065786374	0.7550092292970157	0.9954522129227650	T	T	T
0.7536486785699920	0.7561799228129901	0.0034964205429684	T	T	T
0.3077521076438471	0.4024416987629563	0.0583543964240923	T	T	T
0.5111436992070414	0.4865735546161504	0.1000440048423868	T	T	T
0.4864161012196084	0.2125854517719634	0.1427345500207781	T	T	T
0.7433239790828603	0.7552513304820510	0.1009090075534993	T	T	T
0.6369654483343397	0.9443597844881901	0.1446052612981158	T	T	T
0.5055666526064282	0.3923966333452478	0.1148929682941199	T	T	T
0.5801662121536149	0.2106886800590307	0.1460443750100254	T	T	T
0.4289329252835823	0.1373080361285781	0.1104085925176615	T	T	T
0.2662871739336763	0.3917678134997220	0.1065521235272228	T	T	T
0.6550432276479907	0.6508885878706702	0.1091559122977038	T	T	T
0.7154199448726626	0.8271206564865126	0.1189996987548813	T	T	T
0.5428239668978925	0.8815327433415356	0.1668286515505548	T	T	T
0.6063706852615012	0.9620752506638185	0.1029382842716910	T	T	T

FS: structure11
 structure11
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -5.1406662992261998 8.9038952150168509 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H
 48 1 4 8

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
0.1669311806406936	0.0795183940772473	0.8985728435182750	T	T	T
0.4169431799064124	0.0811165270526698	0.8986609385282481	T	T	T
0.6678164117450354	0.0850277405199902	0.8996597619526704	T	T	T
0.9211649989739510	0.0867023567205188	0.9005371604297154	T	T	T
0.1687321866030860	0.3344880172080853	0.8986541776159562	T	T	T
0.4158394351322652	0.3313066637717645	0.8996066139988369	T	T	T
0.6685994886188176	0.3359462499419835	0.9009958007257077	T	T	T
0.9196809954893712	0.3332694208090890	0.9016729504661957	T	T	T
0.1649219944084088	0.5859252268383194	0.8982387300250197	T	T	T
0.4176961300414302	0.5864887185889426	0.9008730996937692	T	T	T
0.6583087447586087	0.5792894210417574	0.9051334028222977	T	T	T
0.9101445603090653	0.5815312492224955	0.9013399779154898	T	T	T
0.1642082532908780	0.8310454233333486	0.8985195140989537	T	T	T
0.4196979366941577	0.8321454691811671	0.9022789611262086	T	T	T
0.6674611422213002	0.8354665741988717	0.9008452087029898	T	T	T
0.9102638044884365	0.8294352486800400	0.9003274353832804	T	T	T
0.0000031079767925	0.9958385559782209	0.9958169998519013	T	T	T
0.2514856474621727	0.9918608719825495	0.9963126357195990	T	T	T
0.5054802407905749	0.0040707622708611	0.9974417567065162	T	T	T
0.7618364544705823	0.0152277888817202	0.9951162838794938	T	T	T
0.0220071548847885	0.2616716945205275	0.0063779703799010	T	T	T
0.2461447531342141	0.2203837994184216	0.9988346979744965	T	T	T
0.4997630012763187	0.2433289275956914	0.9941514111154928	T	T	T
0.7555954091817016	0.2517715760701402	0.9972391815163647	T	T	T
0.9953894898850828	0.5027432877754496	0.9963680159142420	T	T	T
0.2448568563269031	0.5227868039277472	0.9959832787404843	T	T	T
0.4595884724499138	0.4749145594481496	0.0015064280863476	T	T	T
0.7423777791159193	0.4958095186950350	0.0029054574244524	T	T	T
-0.0001198848686506	0.7503117826847908	0.9962622158713254	T	T	T
0.2499106002240755	0.7572981874845249	0.9960943709937368	T	T	T
0.5025984591187366	0.7565027026463145	0.0021566520416944	T	T	T
0.7562321618834684	0.7578594137493311	-0.0009013634130969	T	T	T
0.2398491185536475	0.3704945181119004	0.0467002637744370	T	T	T

0.7049114151963415	0.5135867251143710	0.0990012463042380	T	T	T
0.5277615458739655	0.2190320054409466	0.1448759899234078	T	T	T
0.6198233742825442	0.7224257736590149	0.0713874052043062	T	T	T
0.7271654104481278	0.9867916525552682	0.1457270077536560	T	T	T
0.6358855131111089	0.4160638369333948	0.1195285486874704	T	T	T
0.4957870301188428	0.1671517116444914	0.1038873778151902	T	T	T
0.4339362816827844	0.1935687848999578	0.1661492503316271	T	T	T
0.2438514832635275	0.3778589367520714	0.0983860595441471	T	T	T
0.6620875055844763	0.5818539189593486	0.1013160478621328	T	T	T
0.6561837854429788	0.8094480786126410	0.1004314349906764	T	T	T
0.6547018477712526	0.0199787549897256	0.1537242602658357	T	T	T
0.8047204448097763	0.0674924931145788	0.1200950204406614	T	T	T

CH_{ad} + H_{ad} = CH_{2,ad}

IS: structure12 + 1/2H₂

```

structure12
1.000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168509      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

```

Cu      C      H
48      1      1

```

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
0.1690797893029672	0.0847350716141815	0.9006571939362109	T	T	T
0.4179916619553714	0.0831036141802663	0.9003109657633360	T	T	T
0.6668786855943303	0.0830000048742520	0.9002645940878647	T	T	T
0.9174336909382708	0.0844063251949066	0.9004745167810122	T	T	T
0.1676784934285903	0.3334527619806131	0.8983697344537894	T	T	T
0.4164208847212044	0.3319961843574068	0.9007062673163510	T	T	T
0.6680965583977018	0.3341404637131512	0.8999624271901154	T	T	T
0.9173819695372359	0.3319787093064946	0.9006230242039024	T	T	T
0.1691647893664399	0.5837364175648394	0.9005247389094562	T	T	T
0.4167573393865562	0.5837713088337718	0.9004696332913263	T	T	T
0.6662759985834190	0.5826039565920085	0.8998091395193728	T	T	T
0.9184708672380814	0.5822906856835297	0.9000122483236948	T	T	T
0.1668492344649174	0.8330552026605826	0.8998946642715926	T	T	T
0.4180027800147123	0.8342453821091800	0.9002846966522356	T	T	T
0.6682005437641427	0.8330642340287434	0.8998138706444373	T	T	T
0.9184206940002462	0.8346548250725266	0.8998251630302391	T	T	T
0.0004632001309419	0.9973312880721583	0.9974656134250055	T	T	T
0.2523213127666472	0.9989950927627188	0.9966800741862102	T	T	T
0.5018252816473860	0.0003296485877587	0.9981712379321596	T	T	T
0.7497906815976459	0.9985515715570571	0.9966050455490448	T	T	T
0.9940737092384703	0.2458814138558585	0.0010740344961507	T	T	T
0.2550259265210070	0.2468447813896210	0.0018520407102087	T	T	T
0.5029551176184787	0.2496083999487158	0.9968079004682658	T	T	T
0.7496499253267551	0.2493761616111358	0.9967148040267096	T	T	T
0.0010144212310525	0.5010891527299395	0.9978309316662138	T	T	T
0.2562671424524902	0.5083040345898927	0.0009819424800641	T	T	T
0.5043632198570699	0.5014283207607121	0.9975469165018483	T	T	T
0.7520863565808913	0.5001098399514583	0.9970964224869037	T	T	T
0.0016598808732038	0.7496496100551249	0.9971607061246115	T	T	T
0.2525573120977133	0.7525029616133478	0.9966795161152879	T	T	T
0.5035202801885618	0.7524811517822553	0.9965557218260545	T	T	T
0.7520469958139443	0.7498254425930566	0.9969661146070382	T	T	T
0.1678062616031696	0.3350697626418442	0.0531458229385832	T	T	T
0.1668810304776620	0.3362453872452075	0.1048259118599761	T	T	T

TS: structure13

```

structure13
1.000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168491      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

```

Cu      C      H
48      1      2

```

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
0.8333333333333286	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
0.3333333333333286	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
0.1664721978439412	0.0842270585358441	0.9008567011889946	T	T	T
0.4152431963397365	0.0822104331843759	0.9003788588372295	T	T	T
0.6655758212316861	0.0826374551525179	0.9004031502597328	T	T	T
0.9152501629473404	0.0822557329382345	0.8995729952453054	T	T	T
0.1654224032941534	0.3327680973390637	0.8988055441824683	T	T	T
0.4131417461251088	0.3315987960461321	0.9011015908616582	T	T	T
0.6656542651736483	0.3319519625020354	0.9003225927073075	T	T	T
0.9158432813678636	0.3309215558311295	0.8994451267323987	T	T	T
0.1669403598385785	0.5818908712076879	0.9006122656991264	T	T	T
0.4171780502447465	0.5839197511306436	0.8995239989966437	T	T	T
0.6665059740697187	0.5812514623723279	0.8995566191353781	T	T	T
0.9181493094069408	0.5796006188627034	0.9006640938011877	T	T	T
0.1653750888251027	0.8324139848264164	0.8998624836406149	T	T	T
0.4158204935507088	0.8330546967491217	0.9000455053304346	T	T	T
0.6672328966608905	0.8321395210747606	0.8991445536465624	T	T	T
0.9162325241895010	0.8311608561201340	0.8993125279413531	T	T	T
0.9962052998918375	0.9911686295694375	0.9962631729161726	T	T	T
0.2483715614226483	0.9999979117702129	0.9970031087375738	T	T	T
0.4975319330756734	0.9997089655592298	0.9976261374714156	T	T	T
0.7428933600486511	0.9918044922155062	0.9962531848513411	T	T	T
0.9843197261096464	0.2314372140394817	0.9978233799454070	T	T	T
0.2429456230589774	0.2510499495448989	0.0038259763488730	T	T	T
0.4953878061011768	0.2482932531992803	0.9969686960101632	T	T	T
0.7449597050622974	0.2469926026738750	0.9980424361186183	T	T	T
0.0001749832076491	0.4950272679170351	0.0002474421684734	T	T	T
0.2639317240831696	0.5139756670144127	0.9988561657255325	T	T	T
0.5045764970441244	0.5003426224367783	0.9970384764519141	T	T	T
0.7503023917506360	0.4974194839722610	0.9971688744915608	T	T	T
0.9993583182087932	0.7454899867292104	0.9968548215457246	T	T	T
0.2498703016224673	0.7518567169206899	0.9964342933350715	T	T	T
0.5033035118272259	0.7526803940411115	0.9961261082549924	T	T	T
0.7495980550963655	0.7463086798807801	0.9967423709506562	T	T	T
0.1498554366638747	0.3491671494158747	0.0530789868489281	T	T	T
0.1513589223421370	0.3559721299202627	0.1046549838687945	T	T	T
0.9729602611585346	0.3393546076717815	0.0499255622112630	T	T	T

FS: structure14

```

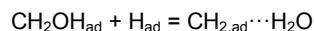
structure14
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -5.1406662992261998    8.9038952150168509    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu   C   H
  48   1   2

```

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
0.1663069106632852	0.0840112950151062	0.9004449004501288	T	T	T
0.4159272402379320	0.0828886026013551	0.9000917045461908	T	T	T
0.6641337505878107	0.0822413196711013	0.8999097334494359	T	T	T
0.9164511736576371	0.0847792755649761	0.9005509197060378	T	T	T
0.1659796272391701	0.3336017889379848	0.8999177395863588	T	T	T
0.4123220851795008	0.3313440052748827	0.9011037077909226	T	T	T
0.6657015566902352	0.3334852706561925	0.8995517252561982	T	T	T
0.9168663058382219	0.3316812099769214	0.9009744460375209	T	T	T
0.1665645827418522	0.5828420443084912	0.9007139982737850	T	T	T
0.4130904319875605	0.5820836399035134	0.9009816294556298	T	T	T
0.6656128388674066	0.5829487589960886	0.8992757987482383	T	T	T
0.9162326532489115	0.5827054242505166	0.8995291774952036	T	T	T
0.1656252807568152	0.8330646358059739	0.8999307874220569	T	T	T
0.4157369903599355	0.8331953078362506	0.9001491304487949	T	T	T
0.6658106015427481	0.8326568832439768	0.8997193449315404	T	T	T
0.9164250663605132	0.8342641053609530	0.8996812027325065	T	T	T
0.9960320279702447	0.9948966970295453	0.9973569297920115	T	T	T
0.2490657336401863	0.9991634220010126	0.9966361513215514	T	T	T
0.4985980108190611	0.0000115144840074	0.9977542413711853	T	T	T
0.7466351855297360	0.9983851802632545	0.9963767480544272	T	T	T
0.9965232909722106	0.2463897712767455	0.9998614254507385	T	T	T
0.2443047637466832	0.2446316096352725	0.0021564195758750	T	T	T
0.4982544784143202	0.2493553755766817	0.9963092324170848	T	T	T
0.7470687908865340	0.2490458505830100	0.9962627647331026	T	T	T
0.9960544441229572	0.5021774021669628	0.9967292923089316	T	T	T

0.2474475561550643	0.5032435322733372	0.0032146523387967	T	T	T
0.5032427732706303	0.5021014922120955	0.9955398855342460	T	T	T
0.7481002196373546	0.4992830831692824	0.9969256542091930	T	T	T
0.9980826914642145	0.7495221315437808	0.9968798098015262	T	T	T
0.2491648689338544	0.7511230659784391	0.9968095472137679	T	T	T
0.4985501111108233	0.7503325010108735	0.9965399146461844	T	T	T
0.7483074051267464	0.7494246482920243	0.9969062960544903	T	T	T
0.1656783084121273	0.3352657679598180	0.0649167344653979	T	T	T
0.2511078508695380	0.3588559727511422	0.1013792712686064	T	T	T
0.0592810814693392	0.2956438383766646	0.0920170877563488	T	T	T



IS: structure15 + 1/2H₂

structure15					
1.000000000000000					
10.2813325984523996		0.0000000000000000	0.0000000000000000		
-5.1406662992261998		8.9038952150168509	0.0000000000000000		
0.0000000000000000		0.0000000000000000	21.2960046855129015		
Cu	C	O	H		
48	1	3	7		
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
0.168533809096672	0.0874111181462714	0.9008454165128637	T	T	T
0.4156341197907690	0.0827105665979053	0.8986850770602873	T	T	T
0.6656753248345894	0.0833188317259762	0.8997756864696931	T	T	T
0.9166068823590351	0.0827552111357013	0.8991430731517965	T	T	T
0.1660461184688242	0.3333655479190994	0.8990741991282793	T	T	T
0.4164543881069411	0.3347538402368605	0.9005203922255317	T	T	T
0.6676861040354696	0.3343550104864375	0.8989881750747329	T	T	T
0.9163480120825650	0.3338723427995001	0.8992960476137237	T	T	T
0.1684260605191121	0.5817352084809395	0.9009271768674896	T	T	T
0.4178026702682042	0.5852618515062845	0.9028718688782057	T	T	T
0.6652151450165750	0.5829905189569463	0.9003259833756042	T	T	T
0.9176291524658873	0.5846967507308403	0.8992185429157086	T	T	T
0.1668527257228474	0.8339403357255692	0.8990856064114863	T	T	T
0.4176192059145208	0.8330256595514273	0.9009947308457379	T	T	T
0.6658945224651892	0.8331168443484442	0.9007845889858739	T	T	T
0.9174713452977307	0.8337763284505050	0.8989674752803816	T	T	T
0.9997806497899088	0.9994944537733912	0.9958412079360406	T	T	T
0.2515242112181819	0.0021956149037850	0.9962784397841292	T	T	T
0.4997230657103484	0.0035084432474432	0.9966059880814782	T	T	T
0.7514652508946347	0.0031066726121596	0.9960429477267945	T	T	T
0.9934272865628530	0.2475042223495052	0.9947285453595014	T	T	T
0.2472397154708108	0.2527247833508871	0.0002153233113339	T	T	T
0.5019411850652097	0.2490378425149813	0.9941278812122138	T	T	T
0.7492830606280726	0.2507357377506424	0.9970434672699092	T	T	T
0.9990266218202296	0.5007943934465964	0.9963199371132986	T	T	T
0.2452594147317333	0.4937004900437044	0.9995384909652523	T	T	T
0.5084583468692969	0.5026481394087151	0.9987259826413269	T	T	T
0.7535228869956896	0.5008161990191210	0.9962173538148950	T	T	T
0.0021030237950963	0.7514806238733654	0.9966651216653321	T	T	T
0.2489054520688908	0.7504406267533433	0.9958345303126828	T	T	T
0.5023626472066147	0.7551178749973250	0.0009605573696485	T	T	T
0.7558673873991503	0.7521987156861141	0.9955538473417817	T	T	T
0.2780548060978343	0.3846938544119176	0.0827457717078280	T	T	T
0.4340924944079917	0.4643677021223326	0.1026076123874668	T	T	T
0.5022043301365975	0.2558200891657452	0.1404516530375737	T	T	T
0.5242580520824341	0.7594682710084356	0.1042093921282939	T	T	T
0.4623270251567780	0.3896635188398909	0.1190745804704333	T	T	T
0.6069791320100509	0.2934069279055612	0.1283024026827013	T	T	T
0.4468637925023969	0.1723789081779068	0.1106996212147186	T	T	T
0.2176934147290873	0.2739922795263080	0.1061123659157336	T	T	T
0.4950512059349899	0.6539024770051208	0.1148341384186824	T	T	T
0.4496042067918455	0.7796664960116660	0.1228971600399354	T	T	T
0.2243978182690146	0.4475061566027050	0.1009427127927274	T	T	T

TS: structure16

structure16					
1.000000000000000					
10.2813325984523996		0.0000000000000000	0.0000000000000000		
-5.1406662992261998		8.9038952150168491	0.0000000000000000		
0.0000000000000000		0.0000000000000000	21.2960046855129015		
Cu	C	O	H		
48	1	3	8		
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
0.1679123478123176	0.0861878563241880	0.9018413180224224	T	T	T
0.4155279635689424	0.0829600957555661	0.8996217729135078	T	T	T
0.6657450461188470	0.0828299430005498	0.9001114630543268	T	T	T
0.91689905122215121	0.0834160747498179	0.9001548687460611	T	T	T
0.1663566503439468	0.3320870757785375	0.9010714189391468	T	T	T
0.4140601299339399	0.3329571539117714	0.9017927841196788	T	T	T
0.6664200757405813	0.3329484373368023	0.8998208606381529	T	T	T
0.9162704025037693	0.3332340019745221	0.9000899436179746	T	T	T
0.1656168459383385	0.5827785962594136	0.9005537593872369	T	T	T
0.4150803280558936	0.5822614212771876	0.8993394135751249	T	T	T
0.6671596453490664	0.5827896791720713	0.8995934019999814	T	T	T
0.9167524605531014	0.5833878687703921	0.9001882305702743	T	T	T
0.1659792138123576	0.8332653600375368	0.9001385158974308	T	T	T
0.4166520292370369	0.8324098426152287	0.9005714497017824	T	T	T
0.6668451202494354	0.8333332421406948	0.8999745845138556	T	T	T
0.9153621803102343	0.8324659309452340	0.9008648377999376	T	T	T
0.9971964994744147	0.9973898281787469	0.9969476244365754	T	T	T
0.2500804103576371	0.9986886163018684	0.9973259768802643	T	T	T
0.4986331818653690	0.9979934043523421	0.9974198558851707	T	T	T
0.7485675162830843	0.9999711691559058	0.9974630788970198	T	T	T
0.9960513622190131	0.2487019556555253	0.9967845255694179	T	T	T
0.2502799978892072	0.2540124203392792	0.0085542006032542	T	T	T
0.5002944065184004	0.2487353197748767	0.9957849078490505	T	T	T
0.7487353640956985	0.2488750029511999	0.9976856865373832	T	T	T
0.9982890361961909	0.4998340403611529	0.9979831936027651	T	T	T
0.2477788399492795	0.5004932699601253	0.9968127389371479	T	T	T
0.5035841906300669	0.5046588384281386	0.9968391308724988	T	T	T
0.7500316939163800	0.4989552028641929	0.9971869761826937	T	T	T
0.9990760381018493	0.7499936454442911	0.9977212163926598	T	T	T
0.2497407467026649	0.7496607456812296	0.9979180020918375	T	T	T
0.5006396833464140	0.7481537145194413	0.9989006952557694	T	T	T
0.7466054407491733	0.7481599412959767	0.0000552229869596	T	T	T
0.2331251419262930	0.2827819639999834	0.1031457314987950	T	T	T
0.3695347578772484	0.3506975922915622	0.1379156466214467	T	T	T
0.5015536280958726	0.1816707527654667	0.1401639176937539	T	T	T
0.5548040157473496	0.6337909287387847	0.1286092608534038	T	T	T
0.41677998418504613	0.2853016376053167	0.1379069893522119	T	T	T
0.6083024884466461	0.2463737959921950	0.1306047773262646	T	T	T
0.4649302949959764	0.1125915653650812	0.1038289218045662	T	T	T
0.1776939544305800	0.3485820512829832	0.1120699209121834	T	T	T
0.1594912587854772	0.1665025491289145	0.1189653084205502	T	T	T
0.4776393138380999	0.5195344234483672	0.1336135160532707	T	T	T
0.5043800432206444	0.6891920426716408	0.1411665885175629	T	T	T
0.570819545817726	0.6525810376572446	0.06556270844449089	T	T	T

FS: structure17

structure17

1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168509	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

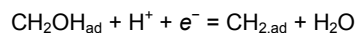
48 1 3 8

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
0.1689154755845517	0.0861586214641722	0.9019776462608292	T	T	T
0.4169865426302674	0.0839120041800397	0.8996610831348036	T	T	T
0.6675796602255619	0.0837862836105286	0.9001831276872622	T	T	T
0.9183466003720068	0.0843608517471058	0.9001652584246607	T	T	T
0.1684161045961762	0.3330646489518245	0.9016547105072314	T	T	T
0.4147405118399111	0.3325733928946244	0.9014335579585219	T	T	T
0.6680449285363567	0.3343429684142687	0.8996755999911997	T	T	T
0.9179970018219614	0.3342334486824260	0.9000803173821701	T	T	T
0.1670462155514482	0.5838060916539878	0.9005224636021329	T	T	T

0.4170402709457696	0.5832340000955563	0.8995236450769764	T	T	T
0.6684228569368943	0.5839487549359085	0.8996346675777267	T	T	T
0.9176860604837845	0.5839689426211482	0.9003668312716602	T	T	T
0.1672415103907320	0.8338689764024620	0.9004384273049475	T	T	T
0.4173768728678875	0.8337112595411063	0.9001054983914375	T	T	T
0.6680910416999004	0.8339918878522979	0.9000778973288731	T	T	T
0.9178367070211156	0.8339476566176575	0.9002695255851709	T	T	T
-0.0007038552330239	-0.0012359221354321	0.9968260959695648	T	T	T
0.2531825917720062	-0.0006734211291652	0.9975584551831090	T	T	T
0.5016873445246404	0.0007069050729940	0.9977818155490317	T	T	T
0.7510795686452285	0.0007162406238580	0.9979344508551398	T	T	T
-0.0013188751662163	0.2506148654106112	0.9968100275019992	T	T	T
0.2537028330117853	0.2533683061237281	0.0092239780711091	T	T	T
0.5040022335841582	0.2508289587922577	0.9956834783099776	T	T	T
0.7518625921550275	0.2512009085723225	0.9978395828404379	T	T	T
0.0014482854452930	0.5012027438670081	0.9982306031307790	T	T	T
0.2525008944948907	0.5043124079831599	0.9969653291293992	T	T	T
0.5050633613092219	0.5040782152991993	0.9957278623598076	T	T	T
0.7518041353604217	0.5010938135908775	0.9980946858003136	T	T	T
0.0019271612003711	0.7512587614542403	0.9980165436665196	T	T	T
0.2525431641440865	0.7514505242094149	0.9986566618962633	T	T	T
0.5024728656967439	0.7515542202640881	0.9973673523548527	T	T	T
0.7512088420660678	0.7506065407232029	0.9984105932752857	T	T	T
0.2210985707342581	0.2475332080405758	0.10265206445542312	T	T	T
0.3549518202761558	0.3168826184514815	0.1450577744975458	T	T	T
0.5172581561255098	0.1949604257814543	0.1373299378626556	T	T	T
0.5166402936511590	0.6017335232862555	0.1407655506193923	T	T	T
0.42314781229937641	0.2683440294592924	0.1398590452077458	T	T	T
0.6180863612691132	0.2668920035449620	0.1215563158558090	T	T	T
0.4773994328620428	0.1194302538523835	0.1029648759972577	T	T	T
0.1581107710855440	0.3035780227968971	0.1159729786618838	T	T	T
0.1572700298696123	0.1305908860147075	0.1186750667637527	T	T	T
0.4189382586697025	0.4339788615522857	0.1405773287107211	T	T	T
0.4590550611506689	0.6537998847407696	0.1431666981085389	T	T	T
0.5675634585216611	0.6330088290632853	0.0991280975088834	T	T	T



IS: structure18

```

structure18
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168509      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

```

Cu      C      O      H
48      1      7      16

```

Selective dynamics

Direct

0.08333333333333357	0.16666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.16666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.16666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.16666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.41666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.41666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.41666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.41666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.66666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.66666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.66666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.66666666666666643	0.8029049805823973	F	F	F
0.0833333333333357	0.91666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.91666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.91666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.91666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.1686685642928798	0.0877709718121013	0.9015096212374626	T	T	T
0.4155070924657950	0.0820869457987142	0.8990715601352257	T	T	T
0.6657962889353377	0.0830810941842712	0.9007932703780377	T	T	T
0.9163682902149005	0.0827356888083718	0.8996768311043619	T	T	T
0.1655948617144312	0.3328927553349944	0.9000708340857151	T	T	T
0.4165188308902957	0.3340610405789621	0.9008865551560825	T	T	T
0.6676239108760500	0.334080918236676	0.8990033427961535	T	T	T
0.9159501306370452	0.3335575127259915	0.8999281222015492	T	T	T
0.1680796616482040	0.5812512815615128	0.9016045423692822	T	T	T
0.4165956418321127	0.5823793647005784	0.9016106829106313	T	T	T
0.6653097172171500	0.5827520940731887	0.9008069010560077	T	T	T
0.9174701314580481	0.5839850011844239	0.8993653011295796	T	T	T
0.1662432567032485	0.8327217526145160	0.8997661263025297	T	T	T
0.4160748390837472	0.8332947204252630	0.9000917698692793	T	T	T
0.6669829906464702	0.8334128754448701	0.8997494474729310	T	T	T
0.9174376499228475	0.8331570059734397	0.8994547806846469	T	T	T
0.9986518554153108	0.9984571003877434	0.9967095552252443	T	T	T
0.2507188135265795	0.0003901797277191	0.9965557573896098	T	T	T
0.4992276909682740	0.9999389168979382	0.9990754111475456	T	T	T
0.7490932832699442	0.9988733506763204	0.9984489982035898	T	T	T
0.9928072594648505	0.2464019250040933	0.9959335936255025	T	T	T
0.2484432888062566	0.2528691681287671	0.0018973030750669	T	T	T
0.5017025150597024	0.2470234957540804	0.9940821512866574	T	T	T
0.7485957026826557	0.2497984371697332	0.9989311082679631	T	T	T
0.9986360743627519	0.4997839500447126	0.9975548621767669	T	T	T
0.2476658640593794	0.4957735546287609	0.0006080087606376	T	T	T
0.5078245168283197	0.5036372826320171	0.9997277092056427	T	T	T
0.7528732391862168	0.4997339810851744	0.9964692361352366	T	T	T
0.0007776367295607	0.7500130769419751	0.9978542835460803	T	T	T
0.2505982088433708	0.7490333062920697	0.9977986174686041	T	T	T

0.5011622449858041	0.7533213978701089	0.9966883379468024	T	T	T
0.7527723067245992	0.7525788522247633	0.9968868473174196	T	T	T
0.2836094831540207	0.3772776260608354	0.0852035797879289	T	T	T
0.4391132199665077	0.4545398684853653	0.1059262807294804	T	T	T
0.5270895110410769	0.2548155761889566	0.1434167296307629	T	T	T
0.5568448670274828	0.7230602308350055	0.1691152843272584	T	T	T
0.8540132971286669	0.4778924073029245	0.1492625034616796	T	T	T
0.2808357681462949	0.9216499684290300	0.1528262152934775	T	T	T
0.8427118400267872	0.8828349291231582	0.1491417392545484	T	T	T
0.9925591658410159	0.7755987814687541	0.1858732059070856	T	T	T
0.4674649125008060	0.3786539388201357	0.1200840477438210	T	T	T
0.6317994294977844	0.3219990678013672	0.1570441552948077	T	T	T
0.5398238776000155	0.2203734374208661	0.1013633420196193	T	T	T
0.2189937268034705	0.2696134071143869	0.1104640794275281	T	T	T
0.2351578498891869	0.4472479053241157	0.1002075393745895	T	T	T
0.5108895899389045	0.6243991683258713	0.1468688766656369	T	T	T
0.5057517034170073	0.7744777835206308	0.1528690824920741	T	T	T
0.7284504635823259	0.8177166647893738	0.1576093065379198	T	T	T
0.8537084507800368	0.8990354281398544	0.1028974307530630	T	T	T
0.9170169332464801	0.8278671208163554	0.1665397970974277	T	T	T
0.9492615247268887	0.6687284420461256	0.1723048048906981	T	T	T
0.1024274926297400	0.8350887307826567	0.1731540320984416	T	T	T
0.8579600523479630	0.4808160909007292	0.1022955511615394	T	T	T
0.9109304923250927	0.4285581319911139	0.1606213042027139	T	T	T
0.2892355429115349	0.9166989139643378	0.1066802035197212	T	T	T
0.3525344000437098	0.0267094056034504	0.1635466940998259	T	T	T

TS: structure19

structure19

1.000000000000000

10.2813325984523996

-5.1406662992261998

0.000000000000000

Cu C O H

48 1 7 16

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
0.1676710451867038	0.0873483688602002	0.9011174338823901	T	T	T
0.4147238806389653	0.0820796001332890	0.8990312244376256	T	T	T
0.6645347634043578	0.0830102497444743	0.9003174658649861	T	T	T
0.9151355853421543	0.0835050786296692	0.8998139551458733	T	T	T
0.1652264488339487	0.3333006475879075	0.8993745519004682	T	T	T
0.4164640935302291	0.3348479494066784	0.9008000993412579	T	T	T
0.6662978110878365	0.3338600526636812	0.8989861029696741	T	T	T
0.9146591866634504	0.3329510630627019	0.8996940798113031	T	T	T
0.1675328902817183	0.5817452210617201	0.9010597317182260	T	T	T
0.4167716467979476	0.5834847323843241	0.9015486893354155	T	T	T
0.6627710974109680	0.5820302606998090	0.9015345039628497	T	T	T
0.9161920773276062	0.5839330159245706	0.8993292428560626	T	T	T
0.1645902882075391	0.8330390105357746	0.8995254474291122	T	T	T
0.4155036303767806	0.8339436712857833	0.8995940516451958	T	T	T
0.6662313410477462	0.8337472704628370	0.8995761833190323	T	T	T
0.9158796530153436	0.8332811169065907	0.8994664052191873	T	T	T
0.9969367306616446	0.9990985515883485	0.9963691820456843	T	T	T
0.2485321519833226	-0.0000223469879125	0.9966805203850407	T	T	T
0.4975290682762978	0.0005792083919042	0.9978205978644067	T	T	T
0.7470807350046167	0.0002494974693138	0.9971136064640463	T	T	T
0.9927287125063847	0.2480294772707585	0.9971286248501763	T	T	T
0.2452258798738513	0.2499817947572552	0.9993217348606063	T	T	T
0.4986796784955271	0.2468807535693785	0.9940858352551881	T	T	T
0.7468638246930501	0.2498547866590848	0.9974955507589697	T	T	T
0.9968533680552421	0.5001696856101771	0.9968262619135558	T	T	T
0.2443986260072527	0.4972005195422331	0.9997843661661668	T	T	T
0.5009422060971738	0.5012486772513508	0.0032400107396821	T	T	T
0.7503500530364735	0.4997924974243169	0.9960832346533226	T	T	T
0.9984719321443627	0.7503120074465638	0.9973579512696611	T	T	T
0.2481656496309982	0.7502634674014017	0.9964194180057218	T	T	T
0.4988972038614508	0.7541091313732479	0.9957485111761420	T	T	T
0.7498623236321103	0.7523340098823783	0.9962884141986191	T	T	T
0.2808935112567167	0.3893411672176915	0.0734218030477072	T	T	T
0.4823525061523041	0.4830792458392784	0.1092115679207989	T	T	T
0.5340263400071892	0.2587067677007946	0.1483415118648324	T	T	T
0.5490761426349720	0.7081127399927671	0.1763447887351734	T	T	T
0.8523500255210246	0.4384651104519597	0.1527656228995392	T	T	T
0.3244920971417030	0.8996793659122593	0.1563279001629138	T	T	T
0.8373323742201613	0.8851708174748014	0.1552315148745683	T	T	T
0.0086340027294116	0.7635962221930115	0.1862495132460545	T	T	T
0.4976333067882734	0.4034613141152249	0.1298142776058483	T	T	T
0.6430439469636988	0.3149750968883465	0.1584212926804320	T	T	T

0.5327705743973516	0.2204394157908834	0.1055734614313272	T	T	T
0.2414071468410542	0.2866383085796441	0.1020146797575069	T	T	T
0.2529634678334450	0.4637750251131404	0.1005915876863451	T	T	T
0.5059659111644366	0.5761081860188628	0.1390817216240396	T	T	T
0.4957514664353151	0.7634261493267872	0.1700307863571196	T	T	T
0.6609749145117145	0.7811063241298329	0.1692770815705065	T	T	T
0.8524551483529886	0.9056425779062688	0.1099983766384562	T	T	T
0.9030896329897777	0.8419395107761546	0.1666187536401257	T	T	T
0.9637052666709528	0.6563346152319514	0.1765182587318114	T	T	T
0.1169952418308818	0.8108851551762011	0.1767305465457072	T	T	T
0.8652669757795557	0.4431390454805798	0.1064607022602942	T	T	T
0.9036258756753556	0.3859095561900303	0.1674343615718806	T	T	T
0.3274570470170193	0.9030239318957938	0.1100793084349739	T	T	T
0.3843426100130987	0.0055191303961357	0.1687025944636798	T	T	T

FS: structure20

```

structure20
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168509      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

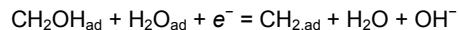
Cu C O H
48 1 7 16

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
0.1684906492142749	0.0841781322813387	0.8999412590004978	T	T	T
0.4163688778687651	0.0825885663829166	0.8993973520353798	T	T	T
0.6655169970478718	0.0825907633897072	0.8996231777217488	T	T	T
0.9176305082384209	0.0848304645614259	0.9002763040025307	T	T	T
0.1678384674116028	0.3334838510114941	0.8996280150954660	T	T	T
0.4155157391360638	0.3342312427684415	0.9029273462657593	T	T	T
0.6670920629936069	0.3340758091397417	0.8990507401450788	T	T	T
0.9174150193428084	0.3322462683366629	0.9001125430379225	T	T	T
0.1682129021783323	0.5831611676637869	0.9002032294738874	T	T	T
0.4151813982391029	0.5806736205116223	0.9039052127644753	T	T	T
0.6632745013307364	0.5814667907819061	0.9015903109302803	T	T	T
0.9174020385234797	0.5833001402108513	0.8991595173521990	T	T	T
0.1665154072497070	0.8326866570410807	0.8999516563115415	T	T	T
0.4168536436725269	0.8329447032594736	0.8999237207903078	T	T	T
0.6665934262034698	0.8323280033916921	0.8996833292575033	T	T	T
0.9173560577305128	0.8334055239014801	0.8992904728721719	T	T	T
0.9992831122218990	0.9952849772776510	0.9960786317476439	T	T	T
0.2516123547544545	0.9983086763619647	0.9968533587121441	T	T	T
0.5012376586060483	0.0003136815061772	0.9974537407448738	T	T	T
0.7498482827166925	0.0000379347546479	0.9961992490511160	T	T	T
0.9980688611847950	0.2496639836448658	0.9988250320407174	T	T	T
0.2457294686032331	0.2416216814329627	0.0012371537561519	T	T	T
0.5009811038764124	0.2463232238703327	0.9949617434062907	T	T	T
0.7491639561991351	0.2489870154922557	0.9964169472166953	T	T	T
0.9983260534217883	0.5022843900783062	0.9968191770307618	T	T	T
0.2433906769246914	0.5007093397954759	0.0023849983563053	T	T	T
0.5085433491730466	0.5040256955103281	0.0047365160223475	T	T	T
0.7536267375144554	0.4986304187024604	0.9962732616778178	T	T	T
0.0005938365475444	0.7491666946377918	0.9973829345552937	T	T	T
0.2514856374911720	0.7511988239251726	0.9971288026923304	T	T	T
0.5007485180068590	0.7535110571942450	0.9966937747877028	T	T	T
0.7538770493981574	0.7538137575927426	0.9964627579832572	T	T	T
0.163688896848410	0.3280238562025512	0.0635771615478463	T	T	T
0.5110737424865431	0.5011948618336852	0.1011386152911570	T	T	T
0.6058409816991221	0.3030995401876885	0.1452972570358290	T	T	T
0.6058969405754656	0.7447941093093812	0.1674955732633439	T	T	T
0.9238945048823836	0.5022723447675327	0.1583530716798367	T	T	T
0.4019647037551005	0.9536893025354212	0.1600458993939530	T	T	T
0.9019003147242370	0.9298959993398326	0.1556243067710179	T	T	T
0.0867837275411337	0.8265982898565267	0.1922700346176229	T	T	T
0.5457266398604985	0.4365448740611163	0.1213477288569705	T	T	T
0.7112063357196005	0.3666826729880689	0.1593136669637253	T	T	T
0.6168431399948388	0.2721624628667328	0.1026221855227409	T	T	T
0.2588177951421853	0.3804355951957008	0.0969124416977546	T	T	T
0.0605860043097366	0.2668923765840079	0.0929661125115440	T	T	T
0.5495222151475125	0.5984066937606941	0.1262460841375472	T	T	T
0.5551695783636010	0.8032954257497044	0.1701125057639323	T	T	T
0.7174943852388310	0.8174147740147630	0.1661352719801994	T	T	T
0.9158404175995213	0.9393250512576481	0.1099966608842204	T	T	T
0.9725770132150402	0.8954914515094082	0.1703658266875663	T	T	T
0.0413405824524132	0.7183174742007419	0.1849333361468864	T	T	T
0.1949262196682051	0.8723821523075024	0.1826993359549106	T	T	T
0.9389865298614694	0.5173490173785831	0.1125336485438071	T	T	T
0.9796622093886660	0.4521382698699926	0.1701249320377900	T	T	T

0.3993501747257910	0.9438071151968670	0.1140863458047013	T	T	T
0.4635032341199830	0.0624640608746509	0.1672467672600224	T	T	T



IS: structure21

```

structure21
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168509      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
48      1      4      9

```

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
0.1684552301671034	0.0865933920190214	0.9008758839449522	T	T	T
0.4158085553932335	0.0817335365418357	0.8986492394510679	T	T	T
0.6658901086630229	0.0835928545894099	0.8991125658134352	T	T	T
0.9175502558711557	0.0837288614659756	0.8991505225240182	T	T	T
0.1667989633157929	0.3333452889344594	0.8996629762414399	T	T	T
0.4169312544123814	0.3331325112148760	0.9001038909361366	T	T	T
0.6683523897046595	0.3343673252141356	0.8987295765987000	T	T	T
0.9169512005625178	0.3340400727577177	0.8995818984845951	T	T	T
0.1692235098446079	0.5817056081569812	0.9013574094094176	T	T	T
0.4177413184622155	0.5826668317894266	0.9007962893407788	T	T	T
0.6670024284503219	0.5849800263018310	0.9021188094838350	T	T	T
0.9184393726029392	0.5846987221245882	0.8992095465695621	T	T	T
0.1661972306813017	0.8333644742555608	0.8992485896792309	T	T	T
0.4165854092023675	0.8336803413030689	0.8991244592762349	T	T	T
0.6687993337491404	0.8330717097362431	0.9003673907359554	T	T	T
0.9138642260837404	0.8314745014857007	0.9015857774274507	T	T	T
0.0017057206862237	0.0012391923545039	0.9957279149162642	T	T	T
0.2520645476647589	0.0011928780439007	0.9961811745784606	T	T	T
0.5007805720443666	0.0004592694346297	0.9970987020273672	T	T	T
0.7502938402122538	0.0033639546844312	0.9948303725975065	T	T	T
0.9955675550510900	0.2483692203666852	0.9953514014960109	T	T	T
0.2480312435378564	0.2524233135439200	0.0008716142489041	T	T	T
0.5024518627274098	0.2465975440843348	0.9935623080268595	T	T	T
0.7502109222797012	0.2495311541217540	0.9972186545595202	T	T	T
0.0010382348325889	0.5001187253694339	0.9966179477521048	T	T	T
0.2510544613608384	0.4967214983666605	0.0004627746244185	T	T	T
0.5055003456144213	0.4986961619125247	0.9975790944199118	T	T	T
0.7544937610683936	0.4986468909222159	0.9953144337873764	T	T	T
0.0034387892723949	0.7506495550286093	0.9965748395098147	T	T	T
0.2511445100036810	0.7500758853494650	0.9965736304381799	T	T	T
0.4997575571533422	0.7537238552957650	0.9945354893026598	T	T	T
0.7525960016026280	0.7530480000984221	0.0040792162142969	T	T	T
0.2944351363804131	0.3898752051180953	0.0833746508867137	T	T	T
0.4503140739074037	0.4544713259884972	0.1019042844502393	T	T	T
0.4867826431146037	0.2221696201675553	0.1387717057412278	T	T	T
0.7147922738031415	0.7394804588721124	0.1041020393059151	T	T	T
0.6570653145499429	0.9616824684068080	0.1461034985273750	T	T	T
0.4671185750969910	0.3704032710566776	0.1159397517314639	T	T	T
0.5936950360471310	0.2537974653853987	0.1381933668328785	T	T	T
0.4458711807022763	0.1508176278984951	0.1031571977525959	T	T	T
0.2247782762797496	0.2828122209724205	0.1084062682668479	T	T	T
0.2552408149167687	0.4665272106727456	0.1001524761291722	T	T	T
0.6195645720078019	0.6447573997163241	0.1109327083165004	T	T	T
0.6985985108077467	0.8204314616465463	0.1214554907532646	T	T	T
0.5612660812987129	0.9228276202842425	0.1679410788238327	T	T	T
0.6408467302807966	0.9959846424623940	0.1049972851140212	T	T	T

TS: structure22

```

structure22
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-5.1406662992261998      8.9038952150168491      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
48      1      4      9

```

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
0.1686055718049463	0.0862526234910319	0.9001880402106116	T	T	T
0.4150051800805201	0.0815005237757415	0.8988701753972155	T	T	T
0.6643041386599493	0.0827906529291944	0.8991038866787905	T	T	T
0.9165709814641484	0.0836877639047735	0.8994682849943801	T	T	T
0.1660277471987578	0.3331429186046609	0.8988473346391127	T	T	T
0.4183205150425156	0.3355734522991980	0.9013401182648509	T	T	T
0.6665929312724926	0.3341701849274135	0.8990917023006038	T	T	T
0.9156042283320351	0.3329860854792232	0.8997805761384549	T	T	T
0.1679822844853306	0.5817691814122422	0.9007758531510818	T	T	T
0.4180921874203935	0.5824537555698440	0.9019749348945688	T	T	T
0.6631614136162070	0.5839640008444283	0.9047985218858861	T	T	T
0.9158585950846949	0.5835108045336025	0.8995621350897639	T	T	T
0.1645991891991289	0.8324669972735091	0.8990725194364206	T	T	T
0.4154266776734162	0.8328885460218081	0.8991872462472964	T	T	T
0.6680327083127140	0.8326263015715905	0.9003665054051833	T	T	T
0.9133713048868426	0.8312003569314592	0.9010741188261938	T	T	T
0.0011797514877619	0.0018319837077806	0.9952609128798439	T	T	T
0.2493103023376226	0.9988826185154521	0.9960539611697738	T	T	T
0.4986181011839725	0.9992469191522640	0.9973392350901694	T	T	T
0.7484795989358408	0.0038832445692174	0.9945526956121127	T	T	T
0.9946250752682749	0.2484941262126527	0.9971808914707468	T	T	T
0.2433707671765729	0.2471335432833578	0.9980354473432000	T	T	T
0.4996317757742116	0.2436827514124429	0.9939755070682663	T	T	T
0.7483231348607765	0.2487681785273892	0.9968619274683501	T	T	T
0.9977955353343023	0.4992866647381399	0.9968813236006580	T	T	T
0.2440842029762643	0.4967893407903055	0.9987729342679642	T	T	T
0.4970943096925031	0.4929791121757209	0.0085227789273781	T	T	T
0.7514527094446668	0.4978332049859799	0.9960309017170943	T	T	T
0.0019438765168608	0.7495971729176084	0.9965570166673388	T	T	T
0.2489087539510406	0.7497647028535643	0.9962655745936851	T	T	T
0.4984400426838286	0.7542634374263991	0.9944485573712650	T	T	T
0.7534156449459037	0.7569026244453794	0.0025898319654636	T	T	T
0.3076510923856676	0.4028273029652561	0.0678544326143563	T	T	T
0.5300098187264295	0.4975726775561307	0.1020828272226512	T	T	T
0.5096305446527915	0.2200036723439725	0.1415705999744680	T	T	T
0.757124027142126	0.7659692105687846	0.1000209355318332	T	T	T
0.6819811921035911	0.9779072407963182	0.1455487067862350	T	T	T
0.5268158470234321	0.4048969084026938	0.1172643474895253	T	T	T
0.6117558332983672	0.2363587067799013	0.1406884741361791	T	T	T
0.4594001724272402	0.1488848541830914	0.1068371611077805	T	T	T
0.2766016632253949	0.3034813183411915	0.0976995911899760	T	T	T
0.2958441617329173	0.4833452500903576	0.0982386226799185	T	T	T
0.6701176670536275	0.6616343482923231	0.1099585282547991	T	T	T
0.7334780267311256	0.8401265450268202	0.1188367040491278	T	T	T
0.5865590751650445	0.9326194168256789	0.1680064393490954	T	T	T
0.6607210092771176	0.0088056485122529	0.1046676941451030	T	T	T

FS: structure23
 structure23
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -5.1406662992261998 8.9038952150168509 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
 Cu C O H
 48 1 4 9
 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
 0.1690954205629306 0.0843174866122849 0.9004350598360782 T T T
 0.4164416440193487 0.0817638001232152 0.8987792236845215 T T T
 0.6653816695600914 0.0831871043171617 0.8990198301493866 T T T
 0.9193102414585459 0.0863346195734497 0.9005156210795505 T T T
 0.1668623113185181 0.3320855681130097 0.8996295277170231 T T T
 0.4159600927479093 0.3324533518346807 0.8994769637511687 T T T
 0.6680747914064118 0.3361593781286433 0.9008375263821973 T T T
 0.9171466642807861 0.3329923669805003 0.9004606307910744 T T T
 0.1666494673299216 0.5831217808756484 0.8999168808434302 T T T
 0.4141409698554762 0.5831130239362556 0.9011425749699629 T T T
 0.6672258431287722 0.5838357273051749 0.9016521518215241 T T T
 0.9144937657773508 0.5823630188300732 0.9017200005477098 T T T

0.1663841603978508	0.8323903701032063	0.8991190115218869	T	T	T
0.4192302173616976	0.8321330370953780	0.9016725191863940	T	T	T
0.6664183890104430	0.8329992498094542	0.9001542184439967	T	T	T
0.9137391131898357	0.8322839386395140	0.9005403512538941	T	T	T
0.0024998071429759	-0.0005534290605691	0.9955501150423051	T	T	T
0.2514274780357167	-0.0008728117270766	0.9968204232115930	T	T	T
0.5001533735844673	0.0006492218781518	0.9969373053840170	T	T	T
0.7539029252970584	0.0080811016769940	0.9938946206942648	T	T	T
-0.0009234463653330	0.2544241658286027	0.0024523199690796	T	T	T
0.2522709178294266	0.2459463390798924	0.0031042001556514	T	T	T
0.4974535429034423	0.2443198421197365	0.9945629299850866	T	T	T
0.7487958580641355	0.2482999161087812	0.9962450661516706	T	T	T
-0.0016303156107066	0.5021787661484196	0.9973811746329925	T	T	T
0.2424810113232112	0.4988335754857522	0.9983341523835284	T	T	T
0.4951030129525314	0.4914783592177530	0.9939810217594466	T	T	T
0.7488209070409180	0.4969545302168745	0.0026865420088075	T	T	T
0.0036035763430349	0.7527378228546282	0.9962977143682391	T	T	T
0.2497304503148672	0.7514464878203437	0.9961682435836093	T	T	T
0.4971602368416724	0.7499159569686151	0.0004600439577009	T	T	T
0.7585270078320834	0.7587585683848935	0.9995630600587544	T	T	T
0.1743305802918773	0.3350475083252631	0.0646339086598292	T	T	T
0.7141504338868362	0.5117438117888850	0.1008687658983029	T	T	T
0.5483236217929188	0.2079332356879749	0.1435971030396249	T	T	T
0.6110296068323248	0.7107989404075385	0.0700210127662601	T	T	T
0.7123307594759801	0.9796392425633959	0.1434368382164037	T	T	T
0.6493611882715078	0.4122763311750263	0.1205881218058196	T	T	T
0.5132941632331530	0.1636826707160240	0.1013260931274731	T	T	T
0.4561192834534336	0.1798549231685665	0.1668095680016752	T	T	T
0.0975082973437549	0.2535838033727574	0.0997290128504485	T	T	T
0.2515652387203730	0.4362948217621113	0.0924203667685174	T	T	T
0.6640098917839091	0.5729435469143518	0.1032648611071559	T	T	T
0.6414548801660522	0.7957614097113268	0.0997105381836529	T	T	T
0.6458223799133923	0.0199131081964461	0.1522876528332126	T	T	T
0.7882223033550011	0.0548488574061511	0.1153514332427016	T	T	T

CH₂OH_{ad} + H_{ad} = CH₃OH

IS: structure15 + 1/2H₂

TS: structure24

structure24		
1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C O H

48 1 3 8

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
0.1674165975887605	0.0851952063152810	0.9004980759692869	T	T	T
0.4162014223579737	0.0826249601436924	0.8991613371623876	T	T	T
0.6660403518426797	0.0832972286987956	0.9000354556258250	T	T	T
0.9167934661807965	0.0834362789993881	0.8996162100647948	T	T	T
0.1676217281809032	0.3339949496114751	0.8985893268178134	T	T	T
0.4161118904975355	0.3337834203659508	0.8994959463788886	T	T	T
0.6670447249517003	0.3336103422508552	0.8991920599804027	T	T	T
0.9163935446805633	0.3326865022496636	0.8998907689193593	T	T	T
0.1676134619864783	0.5817743005605335	0.9009685148192766	T	T	T
0.4176200228154363	0.5855684969290700	0.9023297292683796	T	T	T
0.6678066218848928	0.5840978320275576	0.8992023841682943	T	T	T
0.9174259699168813	0.5837347835869215	0.8996942916910816	T	T	T
0.1670633354425709	0.8335584469574674	0.8997532638925955	T	T	T
0.4179425352101355	0.8328264831281743	0.9015645213290199	T	T	T
0.6657037023063079	0.8328178897791093	0.9009966563295272	T	T	T
0.9177356878622747	0.8342172608737517	0.8994489377198595	T	T	T
0.9996331490564503	0.9981458779601385	0.9965661411407889	T	T	T
0.2514770355434024	0.0009470676639032	0.9973820351779714	T	T	T
0.4995105223412170	0.0028663291787915	0.9968743843251704	T	T	T
0.7510447048913349	0.0023836512413791	0.9958331122719708	T	T	T
0.9958353782890258	0.2479862459392569	0.9968390516964607	T	T	T
0.2503190041051091	0.2497987433783632	0.9991595468684658	T	T	T
0.4995293377793330	0.2501432758207177	0.9951936100257400	T	T	T
0.7485633739675599	0.2504174720694604	0.9969151400900551	T	T	T
0.9988063562781466	0.5013352463701050	0.9969983468792757	T	T	T
0.2485414311279730	0.4976348060224658	0.0002665301259105	T	T	T
0.5057018218290567	0.5006389463482842	0.9952144282577907	T	T	T
0.7513346905560844	0.4998454906367342	0.9969320274987550	T	T	T
0.0018005361769645	0.7506411275174217	0.9973051243794077	T	T	T

0.2493465476403703	0.7501124229939143	0.9971124782317715	T	T	T
0.5001678416331350	0.7501644911502819	0.0025560197920312	T	T	T
0.7541459403031952	0.7501197786556110	0.9959232476404003	T	T	T
0.2683868003103442	0.3951166954464221	0.1229147741284604	T	T	T
0.4106965606306290	0.4702425155192239	0.1431681976255680	T	T	T
0.5245946707735480	0.2939320345894405	0.1414033670087153	T	T	T
0.5372121405914951	0.7707231071719336	0.1068973407773159	T	T	T
0.4579269300579727	0.4020922283568332	0.1430257785669488	T	T	T
0.6210057721926825	0.3470847872566666	0.1189294141020019	T	T	T
0.4633210346819546	0.2107841873655671	0.1121709591707165	T	T	T
0.2063301665366640	0.2731649028758990	0.1290369653924981	T	T	T
0.4997899822347450	0.6692074494732233	0.1248387406970754	T	T	T
0.4762203624691325	0.8096444501817559	0.1248676503123664	T	T	T
0.2069323585641775	0.4555428704131447	0.1282481873806864	T	T	T
0.1604373753971968	0.3290111194650198	0.0396692841240380	T	T	T

FS: structure25
 structure25
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -5.1406662992261998 8.9038952150168509 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
 Cu C O H
 48 1 3 8
 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
 0.1667405698020298 0.0833905276975223 0.8996204570847284 T T T
 0.4162615220736005 0.0830318216944238 0.8990869325745948 T T T
 0.6666361615487234 0.0835096580993276 0.8996226406508786 T T T
 0.9168117060109193 0.0833181340029475 0.8996243648595463 T T T
 0.1668493424919996 0.3333364017998975 0.8995758095022193 T T T
 0.4163523253329076 0.3334263833434395 0.8990592076768632 T T T
 0.6669704956247953 0.3335859794117320 0.8993618820273955 T T T
 0.9168603273650031 0.3334046295184254 0.8999421773942130 T T T
 0.1669870359340954 0.5837591877655446 0.8997557815470757 T T T
 0.4177818914854228 0.5856507064734661 0.9014911539626389 T T T
 0.6667518103097800 0.5836228180043689 0.8995268375446488 T T T
 0.9171264792992154 0.5839965653794821 0.8997542188277824 T T T
 0.1670180163820165 0.8339987972843227 0.8996953669712018 T T T
 0.4179449051519060 0.8323012012262582 0.9015399179450903 T T T
 0.6647151048106756 0.8324217881273425 0.9014563499233975 T T T
 0.9167435465776705 0.8338687488274028 0.8996728140129709 T T T
 0.0003380372119127 0.0004867936058749 0.9966725767969591 T T T
 0.2506478089965183 0.0010390004919524 0.9969953340717624 T T T
 0.5001872887414469 0.0032325850652310 0.9959892803087098 T T T
 0.7525150335125438 0.0036404597370608 0.9959788503596120 T T T
 0.0002958488223550 0.2505129490232638 0.9970177688192691 T T T
 0.2500965403643296 0.2497526978908264 0.9965932644519088 T T T
 0.5002765080402728 0.2499216548074367 0.9956597561750558 T T T
 0.7501526023875142 0.2511134655529526 0.9970823719415021 T T T
 0.9999123163991265 0.5003204158409682 0.9970315157271894 T T T
 0.2474720581190639 0.4976681918358762 0.9961437952284820 T T T
 0.5004352639271975 0.4970170220562922 0.9957073371382053 T T T
 0.7505614363597658 0.4998976221998767 0.9966161231678632 T T T
 0.0004480389688175 0.7503160754347650 0.9969939547019527 T T T
 0.2479038394966956 0.7505153784091642 0.9963847015871395 T T T
 0.4994186354376420 0.7494552137529966 0.0033544103958923 T T T
 0.7528244599881677 0.7495569472654434 0.9961263993643185 T T T
 0.25900450004983774 0.4215142214846245 0.1846513794347240 T T T
 0.4158449806818768 0.5157044636650651 0.1714986783134920 T T T
 0.5252067270650727 0.3260718077882427 0.1465792644436949 T T T
 0.5195127703866135 0.7564465670731925 0.1019904110578025 T T T
 0.4600410906127505 0.4505483922745232 0.1625066682789987 T T T
 0.6190241398156014 0.3781217506837986 0.1226301038453203 T T T
 0.4566268857346123 0.2500348308484910 0.1165691438409910 T T T
 0.2427041847046815 0.3532408640176052 0.2269360506179131 T T T
 0.4741788421591663 0.6603263362155375 0.1282846816908682 T T T
 0.4969224705961354 0.8273424825299093 0.1226596155520052 T T T
 0.2118136323619197 0.4949444502517301 0.1933401451600528 T T T
 0.19868226272502291 0.3469645750763201 0.1447181329797163 T T T

CH_{2,ad} + H_{ad} = CH_{3,ad}

IS: structure14 + 1/2H₂

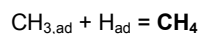
TS: structure26
 structure26
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	H			
48	1	3			
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
0.1678638168267256	0.0830139304377811	0.8993800757610342	T	T	T
0.4166818426861648	0.0821315950446870	0.9004601585971909	T	T	T
0.6661653646696715	0.0820463297509317	0.8999547448016368	T	T	T
0.9197103942769351	0.0855829504683069	0.9012076806512457	T	T	T
0.1679198874279046	0.3324851119069682	0.8996985091239337	T	T	T
0.4147590355156890	0.3311510552772055	0.9006897615268800	T	T	T
0.6667639208845757	0.3333386508943361	0.8993804853080876	T	T	T
0.9168981877664119	0.3329332659523694	0.8996937447057471	T	T	T
0.1677486179615276	0.5811583652359841	0.9007535373239072	T	T	T
0.4146030327239055	0.5815767485544673	0.9011751301690306	T	T	T
0.6682004273533326	0.5836876744426845	0.8992104262168875	T	T	T
0.9176718197056399	0.5836161170948916	0.8997840499044767	T	T	T
0.1673662968976307	0.8323133066963897	0.9002769000393464	T	T	T
0.4177610182918841	0.8326569542128951	0.9004145267873795	T	T	T
0.6674887467305284	0.8325509167306914	0.8996922572876795	T	T	T
0.9183654561643795	0.8351569825016338	0.9001682723218253	T	T	T
0.0037846428198903	0.9972300851147784	0.9985235466917532	T	T	T
0.2525657656750931	0.9966900571607999	0.9977692077124162	T	T	T
0.5011362754518109	0.9977914064304321	0.9975742225937593	T	T	T
0.7510656155162565	0.9988315036289948	0.9961477234350052	T	T	T
0.9953899466648954	0.2553365032495243	0.9976603459650905	T	T	T
0.2565042120130706	0.2464923022511859	0.9992079786734258	T	T	T
0.5053742371042529	0.2497370187743741	0.9964123223199246	T	T	T
0.7486473915294385	0.2493895352345281	0.9964811963152532	T	T	T
0.9994121866106537	0.5035420377126343	0.9974340066599411	T	T	T
0.2458082600693497	0.4926240871209837	0.0024333124188052	T	T	T
0.5067421407587515	0.5025191733213573	0.9951713731090184	T	T	T
0.7517573038518262	0.5004896034853842	0.9969616102813477	T	T	T
0.0007211688001021	0.7490156584718326	0.9973475113538537	T	T	T
0.2522307245102979	0.7471325191153406	0.99698401422216140	T	T	T
0.5005401115702287	0.7482705865781938	0.9970329648856389	T	T	T
0.7526939502887898	0.7511388510539190	0.9969076846563844	T	T	T
0.1626668373893400	0.31336606660682765	0.0654433152056287	T	T	T
0.2454940014474253	0.3734964484778158	0.1029489555218908	T	T	T
0.0544247051576370	0.2437848342800943	0.0904098746606835	T	T	T
0.1583987477739001	0.1362124844478574	0.0543538024337847	T	T	T

FS: structure27

structure27					
1.0000000000000000					
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000			
-5.1406662992261998	8.9038952150168509	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	H			
48	1	3			
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
0.1686424356375323	0.0848718548522096	0.9004999765374947	T	T	T
0.4178950403624793	0.0825560060419136	0.8997620775273290	T	T	T
0.6672787657024625	0.0826319210276055	0.8997378862507622	T	T	T
0.9189856511313740	0.0849687429705303	0.9005444165086691	T	T	T
0.1677071539319869	0.3327780650508255	0.8996421997633393	T	T	T
0.4156530327213875	0.3318380634601394	0.9004825958996077	T	T	T
0.6679734836906596	0.3331304428553218	0.8996442015805597	T	T	T
0.9190821196858134	0.3319497853934123	0.9005938011270043	T	T	T
0.168556788014539	0.5814788018007264	0.9005708337850755	T	T	T
0.4155725726119844	0.5815638303034626	0.9004960915672857	T	T	T

0.6679472369042077	0.5829990478848154	0.8991519190403681	T	T	T
0.9175001037345197	0.5829304270943312	0.8992423693308594	T	T	T
0.1672669415779556	0.8325125812064863	0.8996397157441324	T	T	T
0.4178225670838925	0.8332162153090557	0.8997382438836925	T	T	T
0.6677586877911841	0.8327845663741329	0.8996565947521034	T	T	T
0.9174556040465883	0.8325478337747514	0.8991754354369756	T	T	T
-0.0006212392525081	0.9942874613642479	0.9955673163330158	T	T	T
0.2521774888569213	0.9990047241503933	0.9963254227240249	T	T	T
0.5018078779376565	0.9991193300822642	0.9968442574486329	T	T	T
0.7514624011983760	0.9992533281403749	0.9963573929537455	T	T	T
0.0038115771084673	0.2499338213383185	0.9997339048738675	T	T	T
0.2512505417166672	0.2499345881601642	0.9995156756140258	T	T	T
0.5020154522843606	0.2487565583210598	0.9963133457534628	T	T	T
0.7515508123381669	0.2486879315135199	0.9963750999143343	T	T	T
-0.0005774026102811	0.5015157442788589	0.9956710220257231	T	T	T
0.2511621365021358	0.4973585373072435	0.9996065738565945	T	T	T
0.5068072095618645	0.5016773345509310	0.9955059252098630	T	T	T
0.7519955685355901	0.4994457167589351	0.9967414283932994	T	T	T
0.0014926779374204	0.7489597586582291	0.9967518131833349	T	T	T
0.2522185489709701	0.7494755491704125	0.9963607330612162	T	T	T
0.5017976147408238	0.7495802018550888	0.9963120944411034	T	T	T
0.7520131147626026	0.7489906109248506	0.9967042769319323	T	T	T
0.1703422702770848	0.3323834247186492	0.0779189158420240	T	T	T
0.2277684244301857	0.4471782036085014	0.0981898630471004	T	T	T
0.0558500899153593	0.2746670933619613	0.0984930271120769	T	T	T
0.2283642382518740	0.2754359528271388	0.0980168877040071	T	T	T



IS: structure27 + 1/2H₂

TS: structure28

structure28		
1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.1406662992261998	8.9038952150168491	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015
Cu	C	H

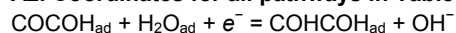
Cu	C	H			
48	1	4			
Selective dynamics					
Direct					
0.0833333333333358	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.3333333333333286	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333357	0.1666666666666644	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333286	0.1666666666666644	0.8029049805823975	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
0.1676371469414900	0.0852233701063579	0.9008275792734554	T	T	T
0.4177378558660995	0.0846572599810273	0.8997368521681358	T	T	T
0.6671821699720606	0.0838553172749662	0.8999226437462606	T	T	T
0.9162395537168964	0.0833092267088078	0.8993395105930639	T	T	T
0.1675366323410451	0.3328640727318501	0.9006139536314344	T	T	T
0.4130084195138988	0.3316855974329442	0.9019722096083909	T	T	T
0.6671683878989861	0.3343562184546987	0.8996080408907551	T	T	T
0.9177643603958401	0.3339483398690491	0.9000381157038224	T	T	T
0.1669935023929172	0.5839026094748447	0.8996164417876226	T	T	T
0.4178917271696312	0.5836981567454310	0.8996500024522246	T	T	T
0.6672285311660461	0.5834723004127718	0.8995200039315593	T	T	T
0.9171393848261188	0.5838587066195275	0.8996725816225948	T	T	T
0.1669508960617042	0.8333737985199519	0.8996207333746369	T	T	T
0.4167120225301733	0.8336872475005498	0.8999793547238608	T	T	T
0.6672289851820007	0.8341718043364719	0.8998883779676665	T	T	T
0.9177672495003429	0.8344270156296671	0.9000514665567864	T	T	T
0.998485545258460	0.0007560914912975	0.9971266255050762	T	T	T
0.2525366318975933	0.9977581464201579	0.9955918328658631	T	T	T
0.5017116352257995	0.0012392997132684	0.9969395140308749	T	T	T
0.7494238083475067	0.0002909305516023	0.9969949508905261	T	T	T
0.9976254310487297	0.2487623507065274	0.9968295289976523	T	T	T
0.2531665354517908	0.2533541359423794	0.0059296051940170	T	T	T
0.5023104709979291	0.2514621581365620	0.9965684174346329	T	T	T
0.7506247378462437	0.2513652245616624	0.9967351560983468	T	T	T
0.0010867183135957	0.5008540239983265	0.9966485986710620	T	T	T
0.2529304391321527	0.5068563662584922	0.9954312707001146	T	T	T
0.5027334427605944	0.5022092951343927	0.9963767174817674	T	T	T
0.7520630405178974	0.5015748096190874	0.9969823146008223	T	T	T
0.0011114162008412	0.7513423308809480	0.9966719413639745	T	T	T
0.2507826912465158	0.7511269742201666	0.9975137769496947	T	T	T
0.5021179914433904	0.7519052018099565	0.9968967417704999	T	T	T
0.7510026318603344	0.7505426016129847	0.9965966930788195	T	T	T
0.2292372825607548	0.2529830572697795	0.1057531455166272	T	T	T
0.2983112723134673	0.3739970078716934	0.1142098500581962	T	T	T
0.1228407458880215	0.2081465499403105	0.1313081432301420	T	T	T
0.2869428788636662	0.1915572178379112	0.1186368608006975	T	T	T
0.0977804328905419	0.1753664306958591	0.0462252109246787	T	T	T

```

FS: structure29
  structure29
    1.0000000000000000
      10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
      -5.1406662992261998    8.9038952150168509    0.0000000000000000
      0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
    Cu    C    H
    48    1    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
    0.1679928036727177    0.0837559734123850    0.8992494721073413    T    T    T
    0.4180407239192466    0.0838530668804992    0.8993208344195548    T    T    T
    0.6680260468532029    0.0838253987732451    0.8993239648819864    T    T    T
    0.9180231573175703    0.0837582582737488    0.8992591547797665    T    T    T
    0.1680112294759181    0.3338417976242680    0.8992136070149656    T    T    T
    0.4181238363554869    0.3339001781031988    0.8992455252717728    T    T    T
    0.6680673472607276    0.3338630795231108    0.8993050163717068    T    T    T
    0.9180117459494339    0.3338806894605790    0.8992500286287717    T    T    T
    0.1680011968752577    0.5838675600313156    0.8992466741539300    T    T    T
    0.4181298061587809    0.5838534364402748    0.8992562942823789    T    T    T
    0.6680587012527525    0.5838366370987154    0.8992889223367966    T    T    T
    0.9180254028901715    0.5838603064233656    0.8992907516712879    T    T    T
    0.1680122087636915    0.8338179844880224    0.8993043063943028    T    T    T
    0.4180540200186060    0.8338469753112991    0.8993268757249514    T    T    T
    0.6680548564889762    0.8338410061999398    0.8992920915727473    T    T    T
    0.9180330880579913    0.8338013120698085    0.8992932707570497    T    T    T
    0.0025483033938397    0.0008497401713070    0.9957963800827150    T    T    T
    0.2525824730515738    0.0009290074235317    0.9958955238313368    T    T    T
    0.50260422426053644    0.0009842286041108    0.9959020614925959    T    T    T
    0.75259878392229342    0.0009449446696295    0.9958986930037740    T    T    T
    0.0023297074574683    0.2508410889266376    0.9955920521369149    T    T    T
    0.2527588536022110    0.2508254075609515    0.9955565357540358    T    T    T
    0.5026324288229999    0.2509869943753313    0.9958961764221795    T    T    T
    0.7526139843611952    0.2509804880635331    0.9958976555680608    T    T    T
    0.0025351396552432    0.5010274499512399    0.9957897618284323    T    T    T
    0.2527476071132999    0.5012786002346141    0.9955734841363475    T    T    T
    0.5027140035520760    0.5010124473317205    0.9958081186010491    T    T    T
    0.7525779649142309    0.5009397685173739    0.9958896146086107    T    T    T
    0.0026280936922789    0.7509804761203210    0.9959031578390702    T    T    T
    0.2525881833585464    0.7509639206503829    0.9958961611948358    T    T    T
    0.5026310898602917    0.7509753024071861    0.9958976861257349    T    T    T
    0.7525675778428624    0.7509793493174544    0.9958740607085159    T    T    T
    0.1724642658558733    0.3335235900342728    0.1570250337992178    T    T    T
    0.2294038114829797    0.4496279987039407    0.1395854643452904    T    T    T
    0.0560423726535395    0.2744240674734783    0.1399898407665890    T    T    T
    0.1732191978956168    0.3338271798560526    0.2085814288993249    T    T    T
    0.2312384658779050    0.2762635421655109    0.1395215638036485    T    T    T

```

A2. Coordinates for all pathways in Table S2



```

IS: structure30
  structure30
    1.0000000000000000
      10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
      -5.1406662992261998    8.9038952150168509    0.0000000000000000
      0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
    Cu    C    O    H
    48    2    5    7
  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
0.1665320055143321	0.0844617504798699	0.8996572463514871	T	T	T
0.4169417701440521	0.0861337028657332	0.8995409744415758	T	T	T
0.6679507650580629	0.0852165142261964	0.8988150903744168	T	T	T
0.9159295942982782	0.0830690293168191	0.8993414210047551	T	T	T
0.1666559931935022	0.3316823690386839	0.9007037645541753	T	T	T
0.4164327048214046	0.3348320811781932	0.9000407930506944	T	T	T
0.6646593665359792	0.3338200900229584	0.9007380504250735	T	T	T
0.9166064378997265	0.3340205114986288	0.8991413413969309	T	T	T
0.1707725363108738	0.5827607162750199	0.9017041990517850	T	T	T
0.4193413036202721	0.5839308218658245	0.9002574349848464	T	T	T
0.6668421218917898	0.5845885067972053	0.9001169095452779	T	T	T
0.9193051940540568	0.5859271275132379	0.9005182733797534	T	T	T
0.1665078821935528	0.8304163978623900	0.9019483146006377	T	T	T
0.4157599734004885	0.8328884010291704	0.8996516277418986	T	T	T
0.6690710949324621	0.8360622652514860	0.8990285259989480	T	T	T
0.9197285992553114	0.8323317567194852	0.9004715417560852	T	T	T
-0.0036707764577819	-0.0014217692371740	0.9954783824948675	T	T	T
0.2503481543048616	-0.0016367291465311	0.9945586024431913	T	T	T
0.5026374490625555	0.0063700337101091	0.9933538084193458	T	T	T
0.7496038535165390	0.0037658934625327	0.9971358780068924	T	T	T
-0.0044370411126822	0.2481884345804427	0.9957349398432713	T	T	T
0.2374992418956727	0.2358011424776356	0.0014254360303524	T	T	T
0.4956299131272479	0.2580289229766222	0.0020770661461061	T	T	T
0.7477318658557957	0.2513267218902776	0.9966866581826213	T	T	T
0.0007574648192713	0.4965293023421287	0.9947035914963270	T	T	T
0.2557058867990041	0.4941474205085790	0.9982720940843564	T	T	T
0.5146092619239837	0.5157502729007538	0.0007644747794962	T	T	T
0.7535889083009055	0.5021156648501712	0.9956562001797186	T	T	T
0.0015560997054198	0.7494797829104685	0.0030335863229975	T	T	T
0.2565273410826043	0.7493264990950893	0.9999218576327397	T	T	T
0.5077346931555721	0.7581203747083224	0.9942199636809360	T	T	T
0.7549868218362821	0.7568046822303549	0.9956865918288869	T	T	T
0.3527459211940190	0.4364686498116922	0.0715134955598792	T	T	T
0.4000170465305665	0.3262375754765014	0.0714478650733751	T	T	T
0.3174238857073857	0.4929362032477805	0.1166375256433776	T	T	T
0.4192354077825577	0.2821459212569516	0.1297385389271311	T	T	T
0.5040837919213121	0.0486002944724382	0.1392641853382870	T	T	T
0.27712224590926364	0.7371620345321911	0.1084102313011304	T	T	T
0.0146112198374112	0.7429332180605087	0.1057132992341258	T	T	T
0.4474524780525867	0.2033582092563781	0.1270803996535680	T	T	T
0.5690627195800836	0.0734625350838664	0.1015360141146933	T	T	T
0.5720589030795212	0.0743919198301420	0.1750271012453700	T	T	T
0.2956453970491909	0.6511802201991580	0.1157225621786297	T	T	T
0.3640643473824238	0.8312530652507156	0.1235356577936053	T	T	T
0.1078231778418052	0.7388842461727708	0.1146377966596160	T	T	T
0.0294271639830398	0.8364933662173210	0.1238091473292588	T	T	T

TS: structure31
structure31
1.0000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-5.1406662992261998 8.9038952150168491 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H

48 2 5 7

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
0.1671036436727962	0.0846551791701591	0.9002931457211806	T	T	T
0.4165816963573948	0.0859549985813190	0.8998582071331723	T	T	T
0.6678146703413056	0.0855098048929128	0.8990662144744750	T	T	T
0.9161728487751837	0.0829317931958598	0.8994084776656410	T	T	T
0.1663923254017101	0.3309755543764811	0.8999490459740380	T	T	T
0.4163787255889198	0.3355417833640684	0.9004251016910166	T	T	T
0.6644139475245335	0.3342571627217277	0.9010325625137936	T	T	T
0.9166332670895792	0.3340179075369418	0.8990936717021705	T	T	T
0.1711583714646042	0.5825257241919203	0.9016851854366165	T	T	T
0.4202099150313899	0.5846858999260811	0.8995291072156515	T	T	T
0.6673132706265810	0.5853449283077048	0.9003813693440263	T	T	T
0.9196158764346943	0.5863516611514275	0.9007237055183881	T	T	T
0.1672747085225974	0.8291623898216777	0.9033364396244498	T	T	T
0.4157071908958275	0.8329344025192920	0.9001338900738046	T	T	T
0.6695171279437423	0.8363083661798341	0.8992304050580218	T	T	T
0.9211080475808335	0.8327532755536223	0.9009023159544876	T	T	T
0.9978219038855481	0.9990931979089012	0.9960796454092511	T	T	T
0.2517549949984157	0.9992758610058147	0.9954935340200489	T	T	T
0.5036403591253936	0.0083295190691137	0.9939348434317815	T	T	T
0.7508340972953732	0.0049903797184307	0.9972330807251978	T	T	T

0.9961940968889890	0.2484592387008745	0.9956443988114210	T	T	T
0.2384532955973390	0.2360111811246711	0.0029061407727656	T	T	T
0.4948383758843534	0.2606185249152914	0.0029139666211731	T	T	T
0.7471531350176468	0.2519611941355989	0.9969950257580378	T	T	T
0.9991768541403429	0.4955150349122832	0.9943830778446876	T	T	T
0.2548696385991516	0.4915490915724457	0.9962121539015206	T	T	T
0.5169137331495790	0.5188650973577216	0.0008653622692369	T	T	T
0.7541067390723089	0.5031872979640010	0.9960538607753811	T	T	T
0.0030360286904680	0.7503526692590835	0.0044696944310899	T	T	T
0.2592722608498765	0.7481491690801333	0.0018141636296567	T	T	T
0.5102056522035952	0.7593055788714252	0.9942999465347694	T	T	T
0.7577756929802381	0.7585108447858033	0.9962468553235501	T	T	T
0.3539208108206906	0.4519921365176534	0.0709315761887647	T	T	T
0.3975124997573877	0.3394674420250830	0.0724473090429417	T	T	T
0.3284051884957471	0.5105211480468757	0.1204769310894030	T	T	T
0.4206661007855750	0.2990156164747164	0.1303281847287738	T	T	T
0.5078933511344962	0.0800392391792692	0.1398124642508330	T	T	T
0.2814160929766699	0.7172737072800728	0.0984285140437397	T	T	T
0.0322431215831396	0.7414282196870902	0.1053160449763316	T	T	T
0.4487012361166636	0.2194354930633116	0.1287009731112374	T	T	T
0.5700265254674182	0.0983706523646511	0.1017072454740512	T	T	T
0.5779559473527074	0.1088834445139819	0.1749666832513831	T	T	T
0.3054731749491773	0.6139659985212672	0.1102761464445053	T	T	T
0.3636006223548402	0.8108705395066607	0.1156354202523068	T	T	T
0.1238519471505713	0.7304250617170769	0.1103831615950745	T	T	T
0.0551165258430376	0.8353205222028685	0.1258341933909531	T	T	T

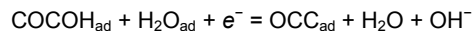
FS: structure32
structure32
1.000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-5.1406662992261998 8.9038952150168509 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
Cu C O H
48 2 5 7

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
0.1673226680140956	0.0859622510229672	0.9003737595537267	T	T	T
0.4165770862750898	0.0863111214218808	0.8997362868644483	T	T	T
0.6680308608239374	0.0862602652960954	0.8990515721774781	T	T	T
0.9163300881865530	0.0835836289098700	0.8993355787220165	T	T	T
0.1668464892747742	0.3319651008400454	0.9000011332645120	T	T	T
0.4165323587898885	0.3363955716996593	0.9004606369430922	T	T	T
0.6647487890070379	0.3349221325174643	0.9008378190612780	T	T	T
0.9172077395127796	0.3348663846079538	0.8990034774791823	T	T	T
0.1718833169832981	0.5832100846352047	0.9019558666927795	T	T	T
0.4203644000628984	0.5857559408980535	0.8997231657222758	T	T	T
0.6669851171206465	0.5858812767891284	0.9005273230300094	T	T	T
0.9200288213215192	0.5870234297206711	0.9007670822480480	T	T	T
0.1673647732212526	0.8297749989946879	0.9032876539386687	T	T	T
0.4159058704153226	0.8339232135272686	0.9001185127400226	T	T	T
0.6692722112646325	0.8370256534701032	0.8994035168390000	T	T	T
0.9212639533915100	0.8332197393874413	0.9008477475206855	T	T	T
0.9975549059409028	0.0004551157484661	0.9958377842384014	T	T	T
0.2517114439433896	0.0012883383009883	0.9952094904475484	T	T	T
0.5043709283906066	0.0100713858672907	0.9937881495451871	T	T	T
0.7512624769920755	0.0066552256066387	0.9973817654244513	T	T	T
0.9964822619990085	0.2497825243174145	0.9955573278589274	T	T	T
0.2376346504639490	0.2370635035981714	0.0032644750601197	T	T	T
0.4949407169556291	0.2611744767140679	0.0024034186532849	T	T	T
0.7478142798162678	0.2532033842612462	0.9967371105719204	T	T	T
-0.0005846904300246	0.4963405010545893	0.9943931318771462	T	T	T
0.2557211120267293	0.4930237212438922	0.9968416307253252	T	T	T
0.5187603108256965	0.5209870830686532	0.0013909846166700	T	T	T
0.7543344846008481	0.5038111051456055	0.9958949933501290	T	T	T
0.0020100169214448	0.7517090017042704	0.0044279721447500	T	T	T
0.2602158033919539	0.7501764509999241	0.0016889752682920	T	T	T
0.5105045364918076	0.7607303382500517	0.9947663904381565	T	T	T
0.7578758564198030	0.7602574467773211	0.9960636587833328	T	T	T
0.3520165010044884	0.4464807302990751	0.0697236065288570	T	T	T
0.4006975405517070	0.3392753109869466	0.0721593204168469	T	T	T
0.3282759892541942	0.5021668621168852	0.1229259763125670	T	T	T
0.4258178405870839	0.3002922991256589	0.1299492199196473	T	T	T
0.5169979825776201	0.0852826210733010	0.1383757154272157	T	T	T
0.2754966928580374	0.7237063152322749	0.0947099840732525	T	T	T
0.0323287532941089	0.7419726087863636	0.1026371134610309	T	T	T
0.4570484066452936	0.2230596457614111	0.1283033372486880	T	T	T
0.5828832784073025	0.1043762424994197	0.1015365249120504	T	T	T
0.5812429075530111	0.1043620231142903	0.1749865607351051	T	T	T

0.3058377515269738	0.5870881908085313	0.1135258303317536	T	T	T
0.3582955259423065	0.8178034959760589	0.1112162991642736	T	T	T
0.1292271699364286	0.7357343129408831	0.1065633965624406	T	T	T
0.0503476684133884	0.8331576667338199	0.1241887882928283	T	T	T



IS:

```

structure33
structure33
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      6      9
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
0.1667481639051737 0.0690345905895395 0.9010263968776309 T T T
0.4172955656737350 0.0706782480805003 0.9000875579446748 T T T
0.6673588612100531 0.0685856592322082 0.8991623267206992 T T T
0.9158376849144751 0.0671481594462267 0.899770696162622 T T T
0.1677928307966630 0.2665576323300476 0.9012378121045539 T T T
0.4161046163695120 0.2693324209309221 0.8997288181747702 T T T
0.6662977115985622 0.2697926006873357 0.9030492049480568 T T T
0.9172913588895236 0.2676217234191521 0.8995894157581068 T T T
0.1713101359832792 0.4674706549075758 0.9026588111517108 T T T
0.4193311101090531 0.4681812704357889 0.8991644143276043 T T T
0.6714497068804838 0.4690034228199604 0.9010403800924074 T T T
0.9169843837014064 0.4670686588496578 0.9013283586314921 T T T
0.1696434260354621 0.6661405891670148 0.9012584159218677 T T T
0.4154904114579939 0.6671183537261927 0.9005494276704170 T T T
0.6690004312338438 0.6679601899657099 0.8991557255033304 T T T
0.9197707226920390 0.6683513424781529 0.8996582526111681 T T T
0.1676141048370821 0.8678450575251044 0.8993354104760944 T T T
0.4170047826595564 0.8681805060540885 0.8989416352090769 T T T
0.6668852912275347 0.8679735060132623 0.8994421182693696 T T T
0.9169383481775248 0.8670124937838365 0.8993160673195884 T T T
0.9936127720865469 0.9972137887676767 0.9966564669177406 T T T
0.2478008191530877 0.9974108255523065 0.9965536816440016 T T T
0.4997874904138080 0.0036105626650501 0.9950541186881047 T T T
0.7474870136486598 0.0015561197640326 0.9973740522160484 T T T
0.9962845409024409 0.1987501526679783 0.9964507404220526 T T T
0.2363274009013699 0.1875199009293972 0.0055220603008509 T T T
0.4903829882407427 0.2049384797666044 0.9997420945232839 T T T
0.7472655764423853 0.1995499050357674 0.9962674921148515 T T T
0.0033460228700283 0.3988035016343264 0.9956402012009239 T T T
0.2561263852821777 0.3946644466442944 0.9992454722204022 T T T
0.5155506366403593 0.4133624604321848 0.9955222272416544 T T T
0.7594884407066380 0.4050306642179579 0.0039925117097825 T T T
0.0060436410242556 0.6054132571382684 0.9961004156977680 T T T
0.2532136691145895 0.600873427773576 0.0036353504911159 T T T
0.5067924884441657 0.6070638708084931 0.9938687253547304 T T T
0.7596561233474035 0.6102202752410578 0.9972101831124611 T T T
0.0031105017596697 0.8034729152930460 0.9968559391005709 T T T
0.2531386294123977 0.8034166810463560 0.9965965454903938 T T T
0.5023807753472934 0.8051239378365117 0.9960890217964226 T T T
0.7505690604103524 0.8039527978841923 0.9965861396004266 T T T
0.3729848912875720 0.3708137825993065 0.0716366416639849 T T T
0.4034984297981595 0.2734466697982643 0.0703944485450533 T T T
0.3792592787396695 0.4338578489623356 0.1198456064930203 T T T
0.4533970999372071 0.2530234354023141 0.1271790737019549 T T T
0.5153059321893331 0.0733446629941681 0.1466546026187158 T T T
0.2633493957533418 0.5753976186795471 0.1028017006237859 T T T
0.7594426396323660 0.4128251450310258 0.1043979701434463 T T T
0.6902965365491216 0.5871067680243427 0.1292094069329617 T T T
0.4574815455008922 0.1767539506236314 0.1277961878710394 T T T
0.5357350488400898 0.0452902453820444 0.1067213579993493 T T T
0.6120398842053804 0.1137816755418659 0.1681943772039142 T T T
0.3087459432316039 0.5225372530832335 0.1125855283715153 T T T
0.3229893641869891 0.6511747411837866 0.1249433148287066 T T T
0.6570057021600751 0.3518568797016857 0.1183310255785380 T T T
0.7642227815889853 0.4892300513515643 0.1166867330382750 T T T
0.5788709111490987 0.5406671396002090 0.1326364167653387 T T T
0.7246241867343649 0.6679471622534531 0.1445782068254946 T T T

```

```

TS: structure34
structure34
  1.000000000000000
    10.2813325984523996    0.000000000000000    0.000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.000000000000000
    0.000000000000000    0.000000000000000    21.2960046855129015
  Cu      C      O      H
  60      2      6      9
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
0.1664228934746707 0.0679663741928281 0.8999518129618630 T T T
0.4181954601757190 0.0701936717191070 0.9013327909091361 T T T
0.6673961280405352 0.0678952266428292 0.8993909765980356 T T T
0.9172695927618026 0.0675952085541356 0.8999019358912826 T T T
0.1684604050488747 0.2688678576867374 0.9008610737241204 T T T
0.4178330311583048 0.2667112756782075 0.9002550831823470 T T T
0.6660641332155699 0.2689611756400175 0.9038109905412161 T T T
0.9173931162509108 0.2682763801293395 0.8997673941583175 T T T
0.1713347145045276 0.4683990431291911 0.9033666887070820 T T T
0.4169655788128219 0.4666589488134729 0.8993005664099475 T T T
0.6696536179259771 0.4681485484877461 0.901709179550212 T T T
0.9163586921491086 0.4670545285893803 0.9009322751771428 T T T
0.1691476380556321 0.6658080181103805 0.9012826532218554 T T T
0.4154008677143006 0.6670380949678134 0.9004288497324323 T T T
0.6675295858122720 0.6662662114148108 0.8998429802453249 T T T
0.9177472918246925 0.6672495075501949 0.9001149826002385 T T T
0.1669573880807571 0.8666507811021348 0.8990557787334007 T T T
0.4167645258907381 0.8678312753330335 0.8990183224205759 T T T
0.6671927535354010 0.8674678004561387 0.8991971887489835 T T T
0.9163717078659168 0.8661553733536728 0.8991079219640323 T T T
0.9959016068474894 0.9974797515343037 0.9961465125463108 T T T
0.2467556238291398 0.9960855233759630 0.9960050434537074 T T T
0.5006083742999791 0.9994894313487168 0.9959656696176613 T T T
0.7492523045902605 0.0002017352813630 0.9973977889608237 T T T
0.996698899800108 0.1992651238705095 0.9962094892224493 T T T
0.2402754170544613 0.1909120067235284 0.9982712787559012 T T T
0.4982216416417300 0.1948016781130373 0.0042148083507130 T T T
0.750632336684869 0.1976552861836806 0.9963887228915967 T T T
0.0030923059585896 0.4001622605045702 0.9960764761458424 T T T
0.2499700436784336 0.4013711876001709 0.0040075833081637 T T T
0.5077736783862719 0.4051045187089025 0.9938157040708487 T T T
0.7600178570106115 0.4043355589497408 0.0023294753398630 T T T
0.0050708341830070 0.6055979554829705 0.9959697433366062 T T T
0.2527298911532450 0.6038883332059116 0.0054777111823617 T T T
0.5025784013482086 0.6043973898008238 0.9941025177761715 T T T
0.7546867734481573 0.6066604220895304 0.9991328017999506 T T T
0.0011912538932615 0.8021846487099042 0.9966977012513106 T T T
0.2520518200797766 0.8032024980812298 0.9964759715672589 T T T
0.5028693689509096 0.8041662364671559 0.9958382822805404 T T T
0.7502902638385887 0.8028990649849301 0.9962396805889153 T T T
0.3654086874669187 0.4023661945529929 0.0861845306285263 T T T
0.3641373098942683 0.3038183293170210 0.0611610184022844 T T T
0.4069129125623092 0.4739783362858597 0.1319104411381282 T T T
0.4750779114837175 0.2396824783331143 0.0979639237290827 T T T
0.5209298631263579 0.0219331038200344 0.1589176439353938 T T T
0.2727929464072948 0.6054200661334341 0.1072397934942328 T T T
0.7571128809715477 0.4000965224591447 0.1000747236122299 T T T
0.7168908473716267 0.5938767807499142 0.1194963807213917 T T T
0.4145545911394206 0.1707524340956526 0.1253590580500400 T T T
0.5457633566412496 0.0154833283051833 0.1151259881206874 T T T
0.6159295285490148 0.083524155394201 0.1766193095360033 T T T
0.3249150629396402 0.5609123795904497 0.1214086765577317 T T T
0.3294282640439679 0.6863774148493740 0.1245230512743707 T T T
0.6490309208429113 0.3353144986542406 0.1086487117872533 T T T
0.7634459860160341 0.4756225899817200 0.1147519491723636 T T T
0.6085828332477732 0.5589562297649694 0.1302320006085862 T T T
0.7707317992022182 0.6740890951203827 0.1376341854842069 T T T

```

```

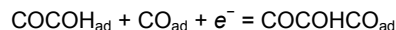
FS: structure35
structure35
  1.000000000000000
    10.2813325984523996    0.000000000000000    0.000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.000000000000000
    0.000000000000000    0.000000000000000    21.2960046855129015
  Cu      C      O      H

```

```

60      2      6      9
Selective dynamics
Direct
0.08333333333333357 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
0.1689506570225753 0.0709518503219311 0.9020362884911529 T T T
0.4170556764884945 0.0679020277394020 0.8997479336592237 T T T
0.6676581210435321 0.0690573988615863 0.9003579740143521 T T T
0.9176235747713378 0.0677218487595309 0.8990062060132811 T T T
0.1680740856953208 0.2683544246846334 0.9001055535819759 T T T
0.4169145713312569 0.2682907216042818 0.9004929069976771 T T T
0.6690782610249176 0.2689739896588889 0.9027868046885689 T T T
0.9154257632691767 0.2686845232608944 0.9025442707033896 T T T
0.1654947403653363 0.4669450200421741 0.9032735519105440 T T T
0.4169209062004042 0.4671809107421758 0.8996514082291356 T T T
0.6663388000734547 0.4666638490133558 0.9042009397473980 T T T
0.9166800754240160 0.4680402149191651 0.9001639414325816 T T T
0.1681780204187181 0.6668576054254591 0.9001107108341820 T T T
0.4144274477529651 0.6661566596079043 0.9006076395028160 T T T
0.6674494218623709 0.6661018366896084 0.9003669833834965 T T T
0.9146758320616435 0.6669306940512535 0.8999566087113662 T T T
0.1668048084073976 0.8677771199894064 0.8991423194419182 T T T
0.4172579296164209 0.8671665575231224 0.8990153271524436 T T T
0.6662721016959543 0.8663196470498762 0.8985336605697319 T T T
0.9171797647421565 0.8675605556073235 0.8990857903055701 T T T
0.9993347164729961 0.9997650116765172 0.9968299368663757 T T T
0.2491579365261058 0.0003078686744330 0.9969888239101959 T T T
0.4949062678281095 0.9963729526157965 0.9960402517018360 T T T
0.7505290627749716 0.9972454181726139 0.9946932828041667 T T T
0.9987215067657480 0.1977454694193689 0.9951037324075256 T T T
0.2467392547650044 0.1966799858378639 0.0050818387685620 T T T
0.4975655194493570 0.1981332817656178 0.9958074387918677 T T T
0.7425696003790272 0.1900137135514587 0.0011219247067395 T T T
0.0023326498759630 0.4031685858374681 0.9997553501704960 T T T
0.2476259310413899 0.4028925526418202 0.9978335633091111 T T T
0.5037570237109983 0.4017588134030847 0.0002651407260454 T T T
0.7521771356751750 0.4044005354251959 0.0005728881225183 T T T
0.0051078673401538 0.6099335838787660 0.9936246491756117 T T T
0.2533463570069460 0.6063200502619335 0.0029467871361488 T T T
0.5024775364725718 0.6049315595771776 0.9951204718429583 T T T
0.7528941143040906 0.6064414860095630 0.0015850045407493 T T T
0.0019069543188911 0.8045034591266309 0.9963382146312604 T T T
0.2511839697581810 0.8039311997565805 0.9963345748248211 T T T
0.5027416484296501 0.8034922812886937 0.9965671904026492 T T T
0.7510092392462694 0.8030449409575653 0.9965478738939672 T T T
0.3173099366948345 0.3826928635186090 0.1126431058752666 T T T
0.3367414549354922 0.3384286793927315 0.0609365907784560 T T T
0.3011363891105078 0.4256833115421163 0.1604175828421203 T T T
0.7222186152584853 0.1884145770460808 0.0985003057315560 T T T
0.7668031813143695 0.0058731356563373 0.1430673161695018 T T T
0.2239845882838838 0.5953054214646328 0.1119018895909787 T T T
0.8863704324919334 0.4139315268774463 0.0740993289615922 T T T
0.7392133996567597 0.5849541204706724 0.1108661355531825 T T T
0.7532902662599531 0.1355105039301699 0.1198356556310938 T T T
0.7021801226646536 0.9471544567436089 0.1112123861012537 T T T
0.8663817815828095 0.0184359981859320 0.1329419438078653 T T T
0.2502823686159996 0.5402040271784956 0.1337549495978770 T T T
0.2910991565931407 0.6752752349079779 0.1286610126766797 T T T
0.7951595903722863 0.2757302009162629 0.1062652182879791 T T T
0.9414503396630662 0.4881312374990827 0.0983265693407610 T T T
0.6460023905370378 0.508483847194348 0.1172386995802407 T T T
0.7189744620763600 0.6464234442463868 0.1272449010025273 T T T

```



```

IS: structure36
      structure36
          1.000000000000000
          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
0.1338547827370192	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: structure37

structure37

1.0000000000000000

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					
0.066666666666700	0.133333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.266666666666586	0.133333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.466666666666757	0.133333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.666666666666644	0.133333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.866666666666599	0.133333333333329	0.8029049805824044	F	F	F
0.066666666666700	0.333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.266666666666586	0.333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.466666666666686	0.333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.666666666666644	0.333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.866666666666671	0.333333333333356	0.8029049805824044	F	F	F
0.066666666666700	0.533333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.266666666666586	0.533333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.466666666666686	0.533333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.666666666666644	0.533333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.866666666666600	0.533333333333314	0.8029049805824044	F	F	F
0.066666666666629	0.733333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.266666666666586	0.733333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.466666666666686	0.733333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.666666666666643	0.733333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.866666666666599	0.733333333333343	0.8029049805824044	F	F	F
0.066666666666629	0.933333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.266666666666515	0.933333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.466666666666685	0.933333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.666666666666643	0.933333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.866666666666599	0.933333333333300	0.8029049805824044	F	F	F
0.1335939788101470	0.0672512936674017	0.8999922591301179	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
0.13411990634445801	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: structure38
 structure38
 1.000000000000000
 12.8516657480654999 0.000000000000000 0.000000000000000
 -6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 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	0.899650909775822	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	0.000408984132252	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

COHCOH_{ad} + H_{ad} = COHCHOH_{ad}

IS: structure39 + 1/2H₂

```

structure39
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710640      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
0.1655294595550417	0.0678437143712803	0.9008402321912767	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	0.9009543309357139	T	T	T
0.4154432989016172	0.2686296177506636	0.9007418287447791	T	T	T
0.6642990505965113	0.2669260109417366	0.9007493612403051	T	T	T
0.9169228426243187	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
0.9159020313461921	0.8656051994990510	0.8997544471190021	T	T	T
0.9917994646294225	0.9953885262120423	0.9967155058463012	T	T	T
0.2473138952294289	0.9971364068518533	0.9966612968055388	T	T	T
0.4988276717277743	0.0017794935534693	0.9958627367077085	T	T	T
0.7460074386084837	0.0001980122044938	0.9977246263141790	T	T	T
0.9935841934619597	0.1980306771168969	0.9963255415832289	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	0.9957918196868719	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	0.9962869856323057	T	T	T
0.7596467558199844	0.6068984170960504	0.9966994878190947	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	0.9976073016529965	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
0.265008893082909	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

```

TS: structure40
structure40
  1.000000000000000
    10.2813325984523996    0.000000000000000    0.000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.000000000000000
    0.000000000000000    0.000000000000000    21.2960046855129015
  Cu      C      O      H
  60      2      4      7
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
0.1654108702571404 0.0683224943405252 0.9007339965517771 T T T
0.4173990977632566 0.0712624873814163 0.9011873352026930 T T T
0.6658120041909831 0.0680739669619935 0.8998573951402085 T T T
0.9146860193776903 0.0668916406117269 0.9000812822579028 T T T
0.1663879792409335 0.2662660483143183 0.9002371873561101 T T T
0.4154322839595538 0.2695302096210844 0.9011238546378166 T T T
0.6641856304978276 0.2681161438017501 0.9009274859426690 T T T
0.9166404100572469 0.2679111285538447 0.8992207545983284 T T T
0.1708336475649986 0.4655299001120818 0.9011292032071503 T T T
0.4189395210357181 0.4679098660561176 0.9002499178976611 T T T
0.6669672518089322 0.4684933322397932 0.9005862360263122 T T T
0.9178003490194031 0.4675929812396922 0.8996478209450602 T T T
0.1672083537995780 0.6669300942583343 0.8996772327023285 T T T
0.4168290225717129 0.6680695116255310 0.8997410228476126 T T T
0.6670908804011217 0.6682809773142907 0.8998291521542729 T T T
0.9186558883016632 0.6678173196880139 0.8995239216944172 T T T
0.1667232224989428 0.8680556704505974 0.8995592759964666 T T T
0.4160979259415039 0.8682903342585077 0.8996955456865102 T T T
0.6657272898181105 0.8679009689934146 0.9003634432225783 T T T
0.9152489343794743 0.8661567922593384 0.8997344157979972 T T T
0.9910512806252059 0.9963984385996199 0.9967978345941236 T T T
0.2465223499454191 0.9978705964583526 0.9964599327832212 T T T
0.4983182452842098 0.0025349026260597 0.9967298570862135 T T T
0.7453639459837627 0.0012567347020838 0.9978319508258098 T T T
0.9925213165896363 0.1988479014653516 0.9960279861224851 T T T
0.2332697163013996 0.1889419082337753 0.001125303177324 T T T
0.4911336507858368 0.2027130682830012 0.0019884358342061 T T T
0.7477222795713573 0.2022921211364444 0.9958874021975643 T T T
0.0022984408622157 0.4014252330420491 0.9953739124411406 T T T
0.2573926279077056 0.3966469446715389 0.9999355093995388 T T T
0.5145973728450450 0.4203690210161960 0.0015700331011469 T T T
0.7543587955504895 0.4047923949849064 0.9980457929805805 T T T
0.0028653886374959 0.6017803655549920 0.9973530781641426 T T T
0.2505031433916444 0.6000779418431801 0.9969191439443936 T T T
0.5026993200475111 0.6083187527359740 0.9963323920470836 T T T
0.7588536689817429 0.6094363217006274 0.9966319079902031 T T T
0.0017317163257424 0.8023284750886159 0.9972063892744799 T T T
0.2495508188578124 0.8007518565019570 0.9970885544779630 T T T
0.4984989778069735 0.8032786629325173 0.9975487734919359 T T T
0.7484638846145341 0.8027879437824383 0.9976489049058320 T T T
0.3210086722316642 0.3190229016594475 0.0707224850142202 T T T
0.4122378064391926 0.2648013758318193 0.0774509554140357 T T T
0.2655244635852053 0.3347381343018519 0.1264599338912357 T T T
0.4381746659661582 0.2379283937563749 0.1349936373408284 T T T
0.6461355885778486 0.1757389598560418 0.1467361150496471 T T T
0.9528920823324316 0.3614471950255379 0.1479812981376736 T T T
0.5146094968634085 0.2097139757249734 0.1360368464046542 T T T
0.6455890342454054 0.1200380416502290 0.1152006323606443 T T T
0.7523995462166901 0.2411307349255923 0.1496806919892701 T T T
0.1829021381411940 0.3506490801228770 0.1187036146904464 T T T
0.9578019141649992 0.4052623068761784 0.1091544578848931 T T T
0.9837853095461264 0.4208638749142102 0.1815413408314074 T T T
0.5742474300193463 0.3374761147124948 0.0441354238525981 T T T

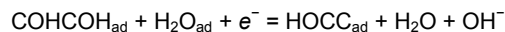
```

```

FS: structure41
structure41
  1.000000000000000
    10.2813325984523996    0.000000000000000    0.000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.000000000000000
    0.000000000000000    0.000000000000000    21.2960046855129015
  Cu      C      O      H
  60      2      4      7
Selective dynamics
Direct
0.0833333333333357 0.1333333333333329 0.8029049805823973 F F F

```

0.333333333333286	0.133333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.133333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.133333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1680891308487931	0.0703982132417028	0.9017030535103504	T	T	T
0.4168985622352864	0.0678836725458265	0.8999208221058423	T	T	T
0.6663870190374938	0.0676036373306952	0.8999892614127709	T	T	T
0.9176016025191248	0.0687167357368375	0.9013194591220353	T	T	T
0.1661905940326897	0.2675904695367606	0.9024200893016407	T	T	T
0.4153069349971192	0.2674896338560020	0.9003557005131206	T	T	T
0.6677698028002352	0.2683349924450044	0.8992128713723637	T	T	T
0.9182249602487291	0.2672373507659620	0.9008271416892197	T	T	T
0.1691633011238748	0.4660985362717918	0.9016190441728942	T	T	T
0.4149000913542944	0.4670011414351646	0.9006176105646461	T	T	T
0.6683617277288342	0.4683395268773037	0.8991579609703159	T	T	T
0.9181648811356763	0.4684846098606558	0.8990439002678347	T	T	T
0.1672229801666463	0.6674567406157845	0.8999775668598243	T	T	T
0.4173373636256216	0.6676839673933310	0.8999843620498917	T	T	T
0.6675546333965510	0.6676125018835321	0.8999644355767391	T	T	T
0.9178391693254127	0.6680118451645006	0.8999373130662970	T	T	T
0.1670921822832410	0.8681870896265230	0.8999492026791558	T	T	T
0.4168815540174671	0.8674153411386867	0.9001453393626768	T	T	T
0.6672008111283755	0.8674445021001891	0.899985947016595	T	T	T
0.9173389410674119	0.8676575614691970	0.8998081559931431	T	T	T
0.9986562100050919	0.9984280170638159	0.9968241260138505	T	T	T
0.2510288688351153	0.0017898107413801	0.9972029060374251	T	T	T
0.4996914553028232	0.0014569837316664	0.9976505245446471	T	T	T
0.7467574695891346	0.9992033229175868	0.9971205505579737	T	T	T
0.9916961231666246	0.1976483061773394	0.0005307381689644	T	T	T
0.2521301029800598	0.2024765479852675	0.0019312997506300	T	T	T
0.5026524500086462	0.2018213068070709	0.9959816721773675	T	T	T
0.7480550668530821	0.2019111122552078	0.9967076374723290	T	T	T
0.9985734062994771	0.4037956119215911	0.9955218720727272	T	T	T
0.2532037378271132	0.4035645182336673	0.0050061250891845	T	T	T
0.5094060686270249	0.4062085546291948	0.9942611760350959	T	T	T
0.7524897303431931	0.4025516281211692	0.9970207738370308	T	T	T
0.0013250546260232	0.6023407577709010	0.9974249199439797	T	T	T
0.2516051148036554	0.6024742573618584	0.9970070846758606	T	T	T
0.5026790969146424	0.6038179541498815	0.9967630105599663	T	T	T
0.7533287303269858	0.6035015402094377	0.9974515069962298	T	T	T
0.0016361535112849	0.8016503788926366	0.9973525432902364	T	T	T
0.2507782930809348	0.8019846522671130	0.9974486974756878	T	T	T
0.4999721762625037	0.8018647051802621	0.9975175217977483	T	T	T
0.7506945932607221	0.8016286306443365	0.9973768200662811	T	T	T
0.2148375734378692	0.2940273788058789	0.0782571967400625	T	T	T
0.3240207913552736	0.2883475011494611	0.1136176576672594	T	T	T
0.0643004188423159	0.2264694661635387	0.1010650703864053	T	T	T
0.3025289010933668	0.2289635979910581	0.1677693283047874	T	T	T
0.5535336638679185	0.2055406037949368	0.1669486445778421	T	T	T
0.8953041888633865	0.3417323788619354	0.1441888496817217	T	T	T
0.3968811252294063	0.2274639113548705	0.1771062095680375	T	T	T
0.532944302079858	0.1492685799979293	0.1324041207500861	T	T	T
0.6635885723031099	0.2553436899305943	0.1676637762825297	T	T	T
0.0286320585445721	0.2794038379141971	0.1185395162878046	T	T	T
0.8805731650273004	0.3647271508997274	0.1013872685567859	T	T	T
0.9521216247604406	0.4179208332451320	0.1664823582121377	T	T	T
0.4411922696966298	0.3403373765915646	0.0974384884205371	T	T	T



IS: structure42
structure42
1.000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
Cu C O H
60 2 6 10
Selective dynamics
Direct
0.0833333333333357 0.1333333333333329 0.8029049805823973 F F F
0.333333333333286 0.1333333333333329 0.8029049805823973 F F F
0.583333333333357 0.1333333333333329 0.8029049805823973 F F F
0.833333333333286 0.1333333333333329 0.8029049805823973 F F F
0.083333333333357 0.333333333333357 0.8029049805823973 F F F
0.333333333333286 0.333333333333357 0.8029049805823973 F F F
0.583333333333357 0.333333333333357 0.8029049805823973 F F F
0.833333333333286 0.333333333333357 0.8029049805823973 F F F
0.083333333333357 0.533333333333314 0.8029049805823973 F F F

0.333333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1668265330663717	0.0690120285929898	0.9007929208350368	T	T	T
0.4177662454100551	0.0701359338072516	0.8997990165447443	T	T	T
0.6671878950597847	0.0682212635942435	0.8994715483026865	T	T	T
0.9161009237559644	0.0672084131864400	0.8998852360121935	T	T	T
0.1691578720024309	0.2669796504811334	0.9018760796154290	T	T	T
0.4165951581311406	0.2694043355275421	0.900030932580216	T	T	T
0.6663168942426287	0.2694943169690113	0.9030785616743656	T	T	T
0.9174587122329454	0.2674725028655767	0.8996582280039391	T	T	T
0.1714341531133112	0.4652163232193074	0.9010493011095105	T	T	T
0.4191884876252508	0.4676174108539728	0.8996872300861026	T	T	T
0.6706422128884236	0.4681186494638112	0.9013461678382548	T	T	T
0.9171054474864738	0.4666708167490399	0.9013313598672732	T	T	T
0.1681410322606502	0.6673272288339830	0.8987852007338754	T	T	T
0.4179388011889060	0.6674583823518582	0.8989380726605674	T	T	T
0.6682307140821614	0.6670957178255245	0.8995852589685612	T	T	T
0.9194223671808169	0.6679861934097729	0.8995040276144725	T	T	T
0.1674962682912715	0.8678551317358445	0.8992123041635476	T	T	T
0.4171436063965624	0.8676984562675354	0.8993279030639233	T	T	T
0.6666672565346029	0.8677118500237351	0.8998903682904315	T	T	T
0.9163000098013920	0.8663998124335572	0.8994799129807453	T	T	T
0.9933645315954822	0.9968308050205337	0.9964583024489130	T	T	T
0.2472789343837217	0.9968689266697693	0.9957986868638803	T	T	T
0.4998005374732719	0.0030353187069363	0.9955368774440448	T	T	T
0.7470973356197141	0.0006885492431873	0.9971921100679089	T	T	T
0.9961415213140484	0.1986028307661559	0.9963047389741176	T	T	T
0.2358827703836566	0.1874550245830863	0.0045757059013368	T	T	T
0.4906132540991027	0.2045228324586464	0.9990424913621841	T	T	T
0.7485474754221324	0.2000209335085164	0.9960340267512567	T	T	T
0.0081905849030562	0.4010650048847578	0.9957802353356022	T	T	T
0.2583640546171971	0.3985445269841962	0.0028563180513411	T	T	T
0.5179919744143168	0.4145517667358674	0.9970828720695011	T	T	T
0.7616481572290434	0.4049772256463011	0.0041417983106288	T	T	T
0.0081377927393008	0.6051937953870018	0.9959558406098041	T	T	T
0.2530248020767438	0.6020954962941223	0.9951517810514857	T	T	T
0.5041714008214178	0.6068711719692801	0.9951411691021650	T	T	T
0.7604384462677675	0.6097720619565041	0.9966669953729266	T	T	T
0.0034879429585416	0.8028538179328701	0.9970031273509132	T	T	T
0.2526568170638833	0.8021664779893242	0.9972916190264659	T	T	T
0.5000686401377306	0.8024439882591845	0.9973580037963613	T	T	T
0.7500889639251733	0.8028216505215101	0.9969359424530895	T	T	T
0.3668546761115086	0.3618372676935061	0.0716889690106624	T	T	T
0.4031136440530980	0.2694014986626899	0.0699200951171666	T	T	T
0.3805147442877705	0.4162971690822442	0.1290641197653741	T	T	T
0.4521157983686288	0.2442675595162714	0.1253922422990292	T	T	T
0.4069830502113018	0.0205606761803078	0.1406125058240277	T	T	T
0.2807078965038062	0.5728066256209581	0.1439372872080346	T	T	T
0.7613957438763324	0.4074185878901804	0.1051561886458751	T	T	T
0.6932839247529715	0.5791922758671687	0.1365619780701906	T	T	T
0.4329199934645541	0.1594032301190147	0.1265927825898955	T	T	T
0.3527111483016669	0.9695886169644731	0.1042374790398680	T	T	T
0.5027619721512834	0.0218055645374753	0.1401945403383876	T	T	T
0.3360073668785595	0.4703490765646308	0.1286992620000282	T	T	T
0.3091250695495348	0.6276941574017398	0.1076825304355242	T	T	T
0.6613027668760960	0.3417330459695676	0.1184586744428517	T	T	T
0.7591373478746661	0.4805648266334678	0.1192556857302692	T	T	T
0.5831635541303657	0.5281130134381788	0.1420744394739450	T	T	T
0.7280596584470399	0.6442747148589353	0.1668959131726105	T	T	T
0.1714780219814404	0.5350358450115423	0.1458605003802845	T	T	T

TS: structure43

```

structure43
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
  Cu    C    O    H
  60    2    6    10

```

Selective dynamics

Direct

0.083333333333357	0.133333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.333333333333285	0.133333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.583333333333357	0.133333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.833333333333285	0.133333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.083333333333357	0.333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.333333333333285	0.333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.583333333333355	0.333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.833333333333284	0.333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.083333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.333333333333286	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

0.8333333333333283	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
0.8333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1676252762856279	0.0658030439216873	0.8994848829651779	T	T	T
0.4202786641891291	0.0690080856563032	0.9013071862864945	T	T	T
0.6684073261914093	0.0663975084409095	0.8996096772800198	T	T	T
0.9188962591562315	0.0666226247555546	0.8998371251211295	T	T	T
0.1711500617013319	0.2678836757798041	0.9015364525024679	T	T	T
0.4201779474476214	0.2656496708420000	0.9002713831096774	T	T	T
0.6680314334123104	0.2676158899465538	0.9036010546139579	T	T	T
0.9189893930311669	0.2669724100484734	0.8997212491786444	T	T	T
0.1720003921584322	0.4649714580097279	0.9016519998526336	T	T	T
0.4175221229976943	0.4655322677284257	0.9002420984897203	T	T	T
0.6693852613135577	0.4661159120135174	0.9016783465271662	T	T	T
0.9175744436746399	0.4658715405288341	0.9004755533689897	T	T	T
0.1683028601735216	0.6658208849535392	0.8988499178500423	T	T	T
0.4182422320619386	0.6664497057472790	0.8990257957542114	T	T	T
0.6675698186627717	0.6648323137680168	0.8999953203560227	T	T	T
0.9180328259805008	0.6658129724607508	0.8997839763399833	T	T	T
0.1678865668865419	0.8652928295644573	0.8991241236536083	T	T	T
0.4178303622319637	0.8661719582341016	0.8994588392768772	T	T	T
0.6678571819684921	0.8662342559288347	0.8997351705373202	T	T	T
0.9165384523778047	0.8643945906113643	0.8991744745469133	T	T	T
0.9978612137569005	0.9949890508427459	0.9957819015908216	T	T	T
0.2492854803639225	0.9923087767264802	0.9958263068324688	T	T	T
0.5030633549659058	0.9961579614360392	0.9963744878996015	T	T	T
0.7517763407115696	0.9977079633244047	0.9971453934690206	T	T	T
0.0009919327566296	0.1976174314495315	0.9961921982260088	T	T	T
0.2438208977224844	0.1863452628883554	0.9967330184345237	T	T	T
0.5038455320231515	0.1929244965039461	0.0034884169701637	T	T	T
0.7555995087897789	0.1962576014971115	0.9959120095863380	T	T	T
0.0083787522246351	0.3998910957098586	0.9958050208537406	T	T	T
0.2539205962282255	0.4041543315985164	0.0094128741476697	T	T	T
0.5096234050857953	0.4038749962553666	0.9949609567715654	T	T	T
0.7644513357733030	0.4034428080883160	0.0012840278812415	T	T	T
0.0086157518224620	0.6041035642525284	0.9956305745209281	T	T	T
0.2535738664227524	0.6016223429117226	0.9962759489097995	T	T	T
0.5035469229998102	0.6039899220264412	0.9954097308728433	T	T	T
0.7559023630034215	0.6040104878653871	0.9979810014520690	T	T	T
0.0027225760368907	0.7993645298876602	0.9967761194256637	T	T	T
0.2535845758501079	0.7990127733984519	0.9976705358560192	T	T	T
0.5021518177417095	0.7994383592423244	0.9975406374212048	T	T	T
0.7519734783272700	0.8001482040447488	0.9967336132904991	T	T	T
0.3610973250377666	0.3892293274169515	0.0876653539604802	T	T	T
0.3621823099659672	0.2956104355320555	0.0608262694031648	T	T	T
0.4126235745299924	0.4505072813093807	0.1411089735409012	T	T	T
0.4948439338431547	0.2324649273342807	0.0952541215970098	T	T	T
0.3518087435269063	0.9989799851538814	0.1515208992554600	T	T	T
0.2966258923112283	0.5888442256007314	0.1521677219790070	T	T	T
0.7707720040496455	0.3955984078172113	0.0983912534018138	T	T	T
0.7283928727133453	0.5855098875087249	0.1263215423234386	T	T	T
0.4376349859105198	0.1579955881609602	0.1202657769444088	T	T	T
0.3451528610231109	0.9524512322269870	0.1138431547321033	T	T	T
0.2488099841902463	0.9629354393971296	0.1665878040934148	T	T	T
0.3681535192388520	0.5057862892807503	0.1466830741344683	T	T	T
0.3129706246462107	0.6288009529658959	0.1109228935184762	T	T	T
0.6620460455674841	0.3276010200101401	0.1065264391743246	T	T	T
0.7758644957531249	0.4696391054537986	0.1146258573922111	T	T	T
0.6205140416891688	0.5461457104990248	0.1371010059186945	T	T	T
0.7731976118968402	0.6697840534710980	0.1378232427537139	T	T	T
0.1875937600669109	0.5387552349192581	0.1553591580864045	T	T	T

FS: structure44
structure44
1.000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H
60 2 6 10

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
0.1647115888805784	0.0664416619311384	0.8998306767434362	T	T	T

0.4172210879853406	0.0707040151033075	0.9016615703459702	T	T	T
0.6675348372505253	0.0706067446143899	0.9021261959923038	T	T	T
0.9150961417079109	0.0666298517213764	0.8991144273768532	T	T	T
0.1673687327339047	0.2678877823409046	0.9000595930987092	T	T	T
0.4161623326393677	0.2683001441605329	0.9005127618816687	T	T	T
0.6647452775469366	0.2676365196796576	0.9055521945463519	T	T	T
0.9129508002225478	0.2668740578668970	0.9004668155915876	T	T	T
0.1709264683672322	0.4665604002157522	0.9001616439414867	T	T	T
0.4179517055490428	0.4682881435133563	0.8993175337700726	T	T	T
0.6691047888646469	0.4677028673106431	0.8997748324888400	T	T	T
0.9190009883420127	0.4672549297629768	0.9007648063369624	T	T	T
0.1644960105391550	0.6654211743879678	0.9015021723029674	T	T	T
0.4178065806197423	0.6689975949485355	0.8985420527066688	T	T	T
0.6672964186937930	0.6675594506314605	0.8988464756926461	T	T	T
0.9205272724060941	0.6665119507986457	0.9004549571788026	T	T	T
0.1674386690399614	0.8674284206295620	0.8996266206247283	T	T	T
0.4169577259218316	0.8684956848119317	0.8996925900895435	T	T	T
0.6664031238312573	0.8677848968862186	0.8997826324404223	T	T	T
0.9152815245549826	0.8649781874647148	0.8993127486976957	T	T	T
0.9923673970913841	0.9955947537050753	0.9961472436776038	T	T	T
0.2456546631294671	0.9960050725950828	0.9968054944979733	T	T	T
0.4963469994819009	0.0015410794648714	0.9970585498455291	T	T	T
0.7468460635342078	0.9987392385518338	0.9968707076566343	T	T	T
0.9947918683756665	0.1969243038310154	0.9946191109098298	T	T	T
0.2316699598178644	0.1884179918218759	0.9983522808878318	T	T	T
0.4894478192963729	0.2030897839821238	0.0046255506750987	T	T	T
0.7465183277499972	0.1989815482378200	0.0037975175105092	T	T	T
0.0137301644297889	0.4003866979945224	0.9939934777338213	T	T	T
0.2583313309856566	0.3988521385461067	0.0025523391369136	T	T	T
0.5162760246238097	0.4170197516029103	0.9966054544241402	T	T	T
0.7556648016056647	0.4066186972316373	0.9978756358616331	T	T	T
0.0069443225529554	0.6023684347584416	0.0040433687413869	T	T	T
0.2562355983662546	0.6016586416418820	0.9956440643502396	T	T	T
0.5048953762331131	0.6086771341067974	0.9955179308224127	T	T	T
0.7559526776337990	0.6114969661120130	0.9947543607898784	T	T	T
0.0017614665569973	0.8019666155623194	0.9968388160753197	T	T	T
0.2505658975276953	0.8002650845942404	0.9972539494932674	T	T	T
0.4999327539427799	0.8030477879027246	0.9972373248528054	T	T	T
0.7496999876955047	0.8031462359115855	0.9977853017434662	T	T	T
0.3673893610613088	0.3582799353979131	0.0788338139352107	T	T	T
0.4015340069993421	0.2777183583751338	0.0569784601188597	T	T	T
0.3613866580015753	0.4002898877976863	0.1354006375786917	T	T	T
0.7856053283404556	0.2447975322211452	0.0992116593648647	T	T	T
0.9659014587085581	0.1601761616036185	0.1458434894493536	T	T	T
0.3054055905241750	0.5776738634364318	0.1425057145896827	T	T	T
0.8837424268313744	0.4807615697471730	0.0746711249923139	T	T	T
0.7335585943624916	0.5686011697527025	0.1498760384849183	T	T	T
0.8562395700400405	0.2227827689138866	0.1192395601120624	T	T	T
0.9588550942845708	0.1037345057932704	0.1130925937430293	T	T	T
0.0735557948322789	0.2125101657281546	0.1525818790787029	T	T	T
0.3356123722992141	0.4676853727725531	0.1339134702123821	T	T	T
0.3521803035148635	0.6327536257387300	0.1065792667858061	T	T	T
0.8302427840218983	0.3342217551597257	0.1006326699060682	T	T	T
0.8352925241857789	0.5138075214829020	0.1024802531863605	T	T	T
0.6254529582672831	0.5132409076276843	0.1533992544073247	T	T	T
0.7425939966189989	0.6417830863452325	0.1318660039036506	T	T	T
0.1993951985722102	0.5547815618348655	0.1397690444395653	T	T	T

OCC_{ad} + H_{ad} = OCHC_{ad}

IS: structure45 + 1/2H₂

```

structure45
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
      Cu      C      O      H
      60      2      2      2
Selective dynamics
Direct
0.08333333333333357 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
0.1687565321116313 0.0702108104932804 0.9015520950387033 T T T
0.4170639190619332 0.0678886148481633 0.9000483632119457 T T T
0.6673028203512106 0.0674389148295429 0.9000475849744818 T T T
0.9176147433876795 0.0674326737446306 0.9000094801295191 T T T

```

0.1674455706147266	0.2676624568651912	0.9000357138308263	T	T	T
0.4172537041741430	0.2681582730469386	0.9006424586260402	T	T	T
0.6676379762090699	0.2680352023187592	0.8999189474551307	T	T	T
0.9174382297180701	0.2679142486277109	0.8997379743187196	T	T	T
0.1695316066179562	0.4685896200819660	0.9019100022043566	T	T	T
0.4173364341395292	0.4672222769904270	0.9002316356119273	T	T	T
0.6645110383349576	0.4669601522212842	0.9013084222634807	T	T	T
0.9178817421008536	0.4688402323011540	0.8992319995982393	T	T	T
0.1687462911405676	0.6670763072604047	0.9015113846052881	T	T	T
0.4152782110688086	0.6665708512398916	0.9012811864560873	T	T	T
0.6674574142332826	0.6672700143039962	0.8995665973153717	T	T	T
0.9181373755341125	0.6679254337252762	0.8995307023424629	T	T	T
0.1670721502447861	0.8675648318133481	0.8996321609680042	T	T	T
0.4175284651897874	0.8678076078159573	0.8996798005913367	T	T	T
0.6675423251541958	0.8673068198086565	0.8996779303744498	T	T	T
0.9174152952034629	0.8671716037415812	0.8995640076713478	T	T	T
-0.0008514958721356	-0.0001622375102425	0.9967697961432646	T	T	T
0.2507779480317451	0.0005266365168138	0.9969098044977596	T	T	T
0.5014117412330971	0.0011703921622397	0.9974731840346769	T	T	T
0.7505591994753164	0.0009118290134902	0.9973440169923293	T	T	T
0.9968846019056702	0.1996256036064775	0.9962419061115395	T	T	T
0.2476156877534132	0.1964210077828024	0.0027052945090298	T	T	T
0.5034352129377649	0.2001522358094979	0.9964596599788750	T	T	T
0.7505580666081230	0.2010450008480963	0.9971068384772214	T	T	T
0.9975942803466886	0.4013282989729920	0.9955358538498735	T	T	T
0.2455439802101263	0.4023386619896910	0.9976865021027215	T	T	T
0.5089374445669820	0.4040937336449231	0.0016498976899576	T	T	T
0.7527852442936943	0.4021328204431834	0.9962920969485568	T	T	T
0.0005253199274352	0.6028748704999938	0.9966918315780878	T	T	T
0.2516004492202810	0.6037496786424543	0.0041528146034608	T	T	T
0.5054673306883286	0.6050103342888817	0.9957022943376274	T	T	T
0.7542251631100216	0.6040920529858687	0.9968099061552873	T	T	T
0.0019871005215857	0.8022017027542847	0.9971286034772046	T	T	T
0.2520022653604977	0.8040510916225075	0.9968573263984760	T	T	T
0.5029469838181172	0.8038953844148817	0.9964690701927857	T	T	T
0.7520097618048469	0.8022366029380861	0.9970670630524250	T	T	T
0.3231972229654974	0.3801356795980342	0.1119589299837675	T	T	T
0.3349438504906609	0.3363686484448250	0.0583880860620591	T	T	T
0.3132854593078415	0.4230188154281412	0.1605513153532226	T	T	T
0.2470525424211257	0.6015546904266161	0.1100369921965346	T	T	T
0.2678040565623223	0.5440607369263482	0.1324317009298940	T	T	T
0.3182137582473153	0.6807097249146385	0.1266450863003738	T	T	T

TS: structure46

```

structure46
1.0000000000000000
  10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
   -6.4258328740327499     11.1298690187710996     0.0000000000000000
    0.0000000000000000      0.0000000000000000     21.2960046855129015

```

Cu C O H

60 2 2 3

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333285	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
0.5833333333333355	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	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
0.8333333333333283	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
0.8333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1672874549189808	0.0667733988318419	0.9010180447616412	T	T	T
0.4161384083057086	0.0652133812875856	0.8997701054580828	T	T	T
0.6662102263355125	0.0650093101581146	0.9001725298919744	T	T	T
0.9161643859056848	0.0646986278316213	0.9002275819157497	T	T	T
0.1652404539505214	0.2641366402068830	0.8988341907338534	T	T	T
0.4171997773978702	0.2665557108215246	0.9010569649276369	T	T	T
0.6672002034234835	0.2652834598367274	0.8998569839804813	T	T	T
0.9167880009604346	0.2650830370253389	0.9001632347932449	T	T	T
0.1671307730703283	0.4662823424604546	0.9008345789714931	T	T	T
0.4160322001836718	0.4647936243526212	0.8996985713186045	T	T	T
0.6644038736670611	0.4648453656659874	0.9008061646341056	T	T	T
0.9164489117979900	0.4661926468296573	0.8991240020153110	T	T	T
0.1674211018878727	0.6645196722259104	0.9013518981406815	T	T	T
0.4140861324224756	0.6639250827956420	0.9013070303130913	T	T	T
0.6663960763440343	0.6646584385327921	0.8996250527115009	T	T	T
0.9156789820120188	0.6650614879507062	0.8999182886296294	T	T	T
0.1650817063102517	0.8644023769650830	0.8993413673059338	T	T	T
0.4159376818447301	0.8651172001478412	0.8998124325261124	T	T	T
0.6657217002894463	0.8646486686013357	0.8996616975040500	T	T	T
0.9153538841404409	0.8644750198661566	0.8995714628579555	T	T	T
0.9968904543695200	0.9947597482345835	0.9968915443747983	T	T	T
0.2480842933573540	0.9945564397495374	0.9963676913187730	T	T	T

0.4985601997754344	0.9962903946471242	0.9976295163575051	T	T	T
0.7482375378684943	0.9963803613340337	0.9970779166985411	T	T	T
0.9949711237486774	0.1950650760260402	0.9974707470224971	T	T	T
0.2454277749347348	0.1892616464330287	0.0016042043206793	T	T	T
0.5007380941571620	0.1948301483289850	0.9960637331920676	T	T	T
0.7477484937797619	0.1959216311402283	0.9972723286584070	T	T	T
0.9939757053588740	0.3965249718472033	0.9953990590819238	T	T	T
0.2403553808367830	0.3969003935659447	0.9946430777902495	T	T	T
0.5037246696835067	0.3972423613532540	0.0012271360342430	T	T	T
0.7501229648657796	0.3968979842188173	0.9960889231965138	T	T	T
0.9975494532218864	0.5980856787612248	0.9962550158909471	T	T	T
0.2488976003915564	0.5987764496841448	0.0036431592774200	T	T	T
0.5028787839180188	0.6008073801225122	0.9954613394906132	T	T	T
0.7489973786942417	0.5973076621239540	0.9984249680514549	T	T	T
0.9982879706178888	0.7966601072004494	0.9968595510033024	T	T	T
0.2493497716538433	0.7987394798179283	0.9967683761888313	T	T	T
0.5005872638028550	0.7993774322652022	0.9965804163649269	T	T	T
0.7494437583509604	0.7976613489457984	0.9969487589008044	T	T	T
0.3837852204755757	0.4032844680260699	0.1020767813456964	T	T	T
0.3075889474490420	0.3219404781457537	0.0561869691047221	T	T	T
0.3868502073011497	0.4536130422312349	0.1511663840894334	T	T	T
0.2517950055967174	0.5868793732267993	0.1077761593442326	T	T	T
0.2932983093005759	0.5393406333367387	0.1270932841163570	T	T	T
0.3103067883686245	0.6673535649343350	0.1254250173749964	T	T	T
0.5314402436605823	0.4648901340230465	0.0711729365531144	T	T	T

FS: structure47

```

structure47
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
  Cu    C    O    H
    60      2      2      3

```

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
0.1679247626094876	0.0690571500462794	0.9010799628697973	T	T	T
0.4166739677873347	0.0677863426851099	0.9001682304485323	T	T	T
0.6671008021193042	0.0671717032081017	0.9000856461119302	T	T	T
0.9169718931578654	0.0667685834970089	0.9000682907204056	T	T	T
0.1666307715220405	0.2667189975948027	0.8993991563579964	T	T	T
0.4165904863693698	0.2678412812130090	0.9003883831302905	T	T	T
0.6667365265220837	0.2673031484088264	0.9000675935886969	T	T	T
0.9173423080236797	0.2673366796554922	0.8996826264093606	T	T	T
0.1692682525615972	0.4680255856518051	0.9017989381678644	T	T	T
0.417521431190882	0.4669158829012751	0.8995958718499166	T	T	T
0.6655806358539591	0.4668858406960933	0.9009158652483242	T	T	T
0.9181896293399757	0.4681926943056792	0.8995247603777419	T	T	T
0.1694630620493669	0.6660707853122407	0.9022545022533905	T	T	T
0.4152400171952242	0.6658369627491185	0.9014689373684928	T	T	T
0.6672654991535815	0.6668678428958597	0.8997422120189211	T	T	T
0.9186358534043007	0.6676366564412173	0.8995580110054358	T	T	T
0.1672821416735457	0.8670782730420623	0.8998095312835906	T	T	T
0.4173436631426170	0.8673580784359951	0.8997316715149082	T	T	T
0.6671676395478470	0.8668698585142053	0.8997451503023992	T	T	T
0.9171519379429836	0.8665761034129916	0.8996104250404272	T	T	T
0.9987884277294400	0.9989062562426291	0.9966459533570901	T	T	T
0.2501853058779573	0.9998015174845805	0.9972082840704274	T	T	T
0.5007095704865387	0.0011846765979802	0.9973841010155127	T	T	T
0.7501871821143155	0.0005052383483061	0.9972941802706274	T	T	T
0.9968385726079481	0.1992844132642668	0.9964479323468510	T	T	T
0.2473652657397105	0.1952532890427936	0.0025488485406503	T	T	T
0.5012142030580412	0.2006417343992445	0.9975821602222026	T	T	T
0.7492867170577568	0.2002816244209612	0.9969734039626543	T	T	T
0.9978099995989063	0.3998364718935843	0.9956246081258484	T	T	T
0.2474428381446694	0.3986006167584348	0.9971025728987577	T	T	T
0.5092856956092779	0.4041172893022853	0.0013828486539739	T	T	T
0.7528467078511167	0.4016369147542399	0.9964821771295269	T	T	T
0.0008086746083892	0.6020041168483001	0.9970220631375011	T	T	T
0.2521524757596507	0.6014835085791735	0.0052188409747122	T	T	T
0.5051392603358059	0.6026133868242358	0.9960939330181199	T	T	T
0.7549412397135016	0.6035015555372543	0.9966979015685182	T	T	T
0.0018569806989600	0.8014943863138696	0.9972309740291909	T	T	T
0.2521139314017541	0.8030047423855452	0.9972221501188714	T	T	T
0.5030912173193707	0.8033742849795891	0.9963525013558203	T	T	T

0.7513540674827675	0.8014516818351191	0.9971113510141515	T	T	T
0.3432646632226265	0.3504523591107476	0.1222341062709782	T	T	T
0.3368117962306837	0.3355385188581070	0.0558283409676976	T	T	T
0.3144950352555395	0.4212616632076468	0.1523155384418882	T	T	T
0.2588483291092128	0.5780652650840290	0.1022803268791107	T	T	T
0.2806319158390869	0.5128514911483245	0.1200302936906640	T	T	T
0.3201512911883233	0.6512407279304465	0.1262172623623517	T	T	T
0.3762439174427832	0.2938465739519832	0.1498887806385578	T	T	T

OC_{Cad} + H_{ad} = OCCH_{ad}

IS: structure45 + 1/2H₂

TS: structure48

structure48
1.000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-6.4258328740327499 11.1298690187710996 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H

60 2 2 3

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
0.3333333333333214	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
0.0833333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333215	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
0.0833333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333215	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
0.0833333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333215	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333214	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333144	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1682847202346174	0.0688558491566844	0.9013092392209550	T	T	T
0.4175030009188876	0.0673821240020914	0.8999621012013652	T	T	T
0.6673643885226752	0.0669438111706433	0.9000301811814791	T	T	T
0.9172871828293435	0.0668778928874856	0.8999198667555890	T	T	T
0.1673909118891372	0.2667268898886071	0.9001092796669621	T	T	T
0.4166562326581102	0.2674451966265202	0.9000465247446108	T	T	T
0.6674467168050100	0.2671041333137901	0.8999847211109059	T	T	T
0.9177022656288960	0.2672199854326706	0.8997155280141913	T	T	T
0.1689718640493963	0.4674488579932541	0.9017233608999655	T	T	T
0.4170156661402883	0.4664125283015727	0.9002097748549986	T	T	T
0.6641288406318213	0.4661731659965372	0.9012102292784457	T	T	T
0.9170858533473808	0.4676446485979082	0.8993664526454687	T	T	T
0.1679528042886206	0.6662080471660650	0.9011154606050190	T	T	T
0.4151548300223523	0.6661607703578224	0.9010999041859813	T	T	T
0.6670200363819979	0.6668484800429769	0.8995957212866269	T	T	T
0.9174105759184170	0.6668857380616290	0.8993692172910273	T	T	T
0.1669222666602627	0.8667909782729358	0.8994168184968763	T	T	T
0.4174273976842797	0.8670614557430240	0.8996788005785371	T	T	T
0.6674439425647360	0.8669958287953623	0.8997235467581781	T	T	T
0.9169402993443063	0.8662624420809807	0.8995556240976273	T	T	T
0.998066141806303	0.9977432473724722	0.9966896406573683	T	T	T
0.2505923946903267	0.9983941697213293	0.9967320336020214	T	T	T
0.5017056911599181	0.0000215298194003	0.9971118846356603	T	T	T
0.7504932833245260	0.9997748330653766	0.9975331412245668	T	T	T
0.9975478649159246	0.1980062063692988	0.9963327542537549	T	T	T
0.2453345864772347	0.1929291318263968	0.00232081004050110	T	T	T
0.5042801856493857	0.1994476780608427	0.9978128946575849	T	T	T
0.7514533148992253	0.1997435761499858	0.9967336804998080	T	T	T
0.9977012829942145	0.3998836907807953	0.9957593895920577	T	T	T
0.2460114876862453	0.4012457773366714	0.997726567301511	T	T	T
0.5093824460157519	0.4055781653892698	0.0016532813610577	T	T	T
0.7530916172199547	0.4009699753706797	0.9964479426033905	T	T	T
0.9997929930333370	0.6014283041900578	0.9965254592268908	T	T	T
0.2504639367129571	0.6020306831552724	0.0027079431156697	T	T	T
0.5046909746068334	0.6038505064730892	0.9956884319419890	T	T	T
0.7538539398902995	0.6035795579151686	0.9968053152684531	T	T	T
0.0014535029410256	0.8006705235726005	0.9967828698279612	T	T	T
0.2515711858077080	0.8023218576991482	0.9965905544010779	T	T	T
0.5026374717548774	0.8024916332894954	0.9965561167143483	T	T	T
0.7510406152543059	0.8009615476105870	0.9972977786036259	T	T	T
0.3264384272768496	0.3614599169659233	0.1198458125828695	T	T	T
0.3281858512465001	0.3371078437153724	0.0603274945913651	T	T	T
0.3232696427370364	0.3884801289408941	0.1731625935787935	T	T	T
0.2532165593418416	0.6040101223987211	0.1107841791232597	T	T	T
0.2649118351042286	0.5410935068833502	0.1314893419262242	T	T	T
0.3395949373416158	0.6799667652849467	0.1239205018879271	T	T	T
0.4204101503526320	0.2656359143451184	0.0431528475350018	T	T	T

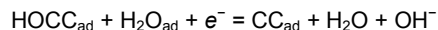
FS: structure49

structure49
1.000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

```

-6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu    C    O    H
60    2    2    3
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
0.1671288937636594    0.0675392183336660    0.9002726375483387    T    T    T
0.4177524176931110    0.0693419349380502    0.9009024751933858    T    T    T
0.6676478409744976    0.0675901086309765    0.8998774714741183    T    T    T
0.9160939468234258    0.0662698737280077    0.8995930472046880    T    T    T
0.1678024631504020    0.2663604506477650    0.9005536064445385    T    T    T
0.4166343956536480    0.2681063598894046    0.9001455878837744    T    T    T
0.6656694963950850    0.2671498476862012    0.9007485059426907    T    T    T
0.9172385308618507    0.2672323198409657    0.8991985726008844    T    T    T
0.1704148820572203    0.4677284199642782    0.9021797519736569    T    T    T
0.4190228906069973    0.4668623980715726    0.9003366008675987    T    T    T
0.6673374704228690    0.4672270790999859    0.9003560209196145    T    T    T
0.9187554155250746    0.4675645213427119    0.8993866975067042    T    T    T
0.1698527589452342    0.6660128473989700    0.9017750234750691    T    T    T
0.4159527640295843    0.6666741815436334    0.9009715215590118    T    T    T
0.6688297550184942    0.6676849001747435    0.899089363363731    T    T    T
0.9198865275848621    0.6675540626055642    0.8993170287222025    T    T    T
0.1680921457857731    0.8668029095625688    0.8995303802361942    T    T    T
0.4178111641642179    0.8679586309358116    0.8995941356368140    T    T    T
0.6674334270738668    0.8669355392648243    0.8998047869835181    T    T    T
0.9171368479995959    0.8658755396475886    0.8994558010120441    T    T    T
0.9963030920477312    0.9970386606654321    0.9962244564228534    T    T    T
0.2489916459122841    0.9968977494415113    0.9965121241697168    T    T    T
0.5014499877026355    0.0024756983813781    0.9969757857592297    T    T    T
0.7497409119525252    0.0007320851889870    0.9972337116007297    T    T    T
0.9970555386904854    0.1985383472705438    0.9953939444910010    T    T    T
0.2412757386929224    0.1901705695836928    0.0009590796739595    T    T    T
0.4989517983599872    0.2047444449378643    0.0005140575533572    T    T    T
0.7495521854568954    0.2004573919057202    0.9962970539935464    T    T    T
0.0006708943683253    0.3988958690314505    0.9954409220036370    T    T    T
0.2542392068778224    0.3958234295888670    0.9975918541710828    T    T    T
0.5146645190305831    0.4103577981697672    0.0006660841317776    T    T    T
0.7572274769522533    0.4034764170282403    0.9961315525972810    T    T    T
0.0032384561704845    0.6017977469215635    0.9968628999322161    T    T    T
0.2540251836793700    0.6001198706678035    0.0039608599033058    T    T    T
0.5081205251371101    0.6050161776045302    0.9948425646111827    T    T    T
0.7584141069775835    0.6061079610610985    0.9962061651346026    T    T    T
0.0029163858963157    0.8013236202779230    0.9969197008860343    T    T    T
0.2533202588761906    0.8018707814679686    0.9969426384154171    T    T    T
0.5036162190038992    0.8035898854481843    0.9962995821875867    T    T    T
0.7518358213857091    0.8020133150990726    0.9971711033433677    T    T    T
0.3462595768062993    0.3420719685262523    0.0753786357143121    T    T    T
0.4110931273692201    0.2710841500473224    0.0665945458741636    T    T    T
0.3016585242462008    0.3832824644910129    0.1179262688442493    T    T    T
0.2639132667481436    0.5780662877010359    0.1052929005881639    T    T    T
0.2783569307122019    0.5079584112708194    0.1140815967907793    T    T    T
0.3498446119476487    0.6478974658152500    0.1239214401392152    T    T    T
0.4453389926769025    0.2423485175710668    0.1091318475033931    T    T    T

```



```

IS: structure50
structure50
1.000000000000000
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    9
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
0.1651930103523781	0.0669405264648142	0.8995980396108529	T	T	T
0.4175693661396941	0.0702554849871103	0.9011355520775336	T	T	T
0.6678394937149041	0.0667187606752577	0.9020109319162286	T	T	T
0.9136192913550234	0.0662191810871127	0.9012105359232432	T	T	T
0.1668125450412867	0.2669148110497242	0.9001670760970474	T	T	T
0.4159474651454541	0.2678304353304873	0.9005182979546482	T	T	T
0.6636444894115443	0.2669933329255090	0.9012528858496721	T	T	T
0.9157429406288975	0.2673790488611957	0.8996594686800786	T	T	T
0.1703463522143592	0.4650722740785309	0.9012757517127693	T	T	T
0.4176230096032691	0.4670882376448607	0.8995590037687928	T	T	T
0.6688163155880613	0.4677164013562294	0.8988145235375777	T	T	T
0.9199990325040625	0.4672532141769207	0.8996297616657556	T	T	T
0.1687071830697606	0.6668355711814939	0.8994014875562845	T	T	T
0.4180880478680807	0.6677237858911760	0.8987901865060147	T	T	T
0.6680205325551932	0.6676320898799692	0.8997709081342052	T	T	T
0.9207829140742100	0.6677123970576830	0.8986903876123766	T	T	T
0.1684590438845046	0.86777620403332181	0.8991900823516128	T	T	T
0.4179574260879140	0.8681728465194436	0.8996921576716886	T	T	T
0.6687695031208110	0.8684038141335820	0.9029610955760309	T	T	T
0.9148702187875174	0.8648635947616329	0.8998211301006311	T	T	T
0.9954344577034531	0.9959627588039884	0.9951655491640832	T	T	T
0.2469049267498829	0.9962604173398619	0.9965318399980257	T	T	T
0.4972260300969379	0.0022503425551608	0.9969864651022602	T	T	T
0.7470244237037564	0.0005704261874961	0.0040200080801730	T	T	T
0.9947686145060387	0.2006270174063768	0.9956263744588959	T	T	T
0.2332741520206233	0.1896341950190008	0.9983976997208386	T	T	T
0.4964369352880447	0.2038413924533998	0.0042949822722137	T	T	T
0.7475080281394700	0.2029522724382515	0.9965458622115768	T	T	T
0.0050282950893706	0.4010653555959016	0.9974853979412913	T	T	T
0.2563322439077427	0.3976469024972142	0.0035038046659641	T	T	T
0.5193038581167373	0.4158646655320909	0.9960169803443574	T	T	T
0.7596564257328986	0.4044919287869420	0.9963236092684575	T	T	T
0.0055822363652837	0.6015538592475859	0.9973945243794509	T	T	T
0.2523320904081874	0.5996068051502942	0.9962105350415322	T	T	T
0.5032749084286070	0.6055222714610103	0.9949559816460651	T	T	T
0.7609088403158375	0.6059408088439091	0.9946123933756511	T	T	T
0.0044599362396873	0.8005138792589493	0.9960718366567131	T	T	T
0.2511140100452505	0.7998008437700409	0.9971543649396376	T	T	T
0.4969859802006488	0.7997312309990150	0.9962272994830992	T	T	T
0.7513895083810652	0.7989796114150143	-0.0005071357768623	T	T	T
0.3629925123643621	0.3508155331114061	0.0781417956251768	T	T	T
0.4075719695460910	0.2766913776523744	0.0557798643445229	T	T	T
0.3640868000546010	0.3951759064028046	0.1351227913423834	T	T	T
0.7281695704009865	0.9811059970446263	0.1064044764574238	T	T	T
0.2339814912617781	0.5252767643726288	0.1440527684697021	T	T	T
0.7897463973841445	0.8015161152313938	0.1222791214253703	T	T	T
0.6861681656689170	0.5686078413326756	0.1541717121071630	T	T	T
0.7493208522460770	0.9158993285062443	0.1186068776679612	T	T	T
0.3135638913983185	0.4465769582335619	0.1358214638980225	T	T	T
0.3058883667223040	0.6114569321265889	0.1443077103344653	T	T	T
0.8001883311649776	0.0534653545987374	0.1287130358662544	T	T	T
0.8956885690082989	0.8282060199592698	0.1150194482272018	T	T	T
0.5783452599409008	0.5084661477516005	0.1538059220544125	T	T	T
0.7427498988824793	0.7150410230579077	0.1354989826594886	T	T	T
0.1761928516037863	0.5132034882945183	0.1049137194082818	T	T	T
0.7301539677927937	0.5392615102631845	0.1229537219335296	T	T	T

TS: structure51
structure51
1.000000000000000
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 9
Selective dynamics
Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333285	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
0.5833333333333355	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	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
0.8333333333333283	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
0.8333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1661672459675633	0.0676898035994226	0.8998488716945252	T	T	T
0.4186295121693272	0.0709801670306435	0.9023105161254527	T	T	T
0.6672328093503327	0.0663098835377187	0.9017527291104225	T	T	T
0.9129093751476788	0.0653802069902223	0.9006402431671104	T	T	T
0.1650292660492204	0.2656228872046275	0.8999268703690948	T	T	T
0.4151677546531795	0.2667694607211461	0.8997497471688338	T	T	T
0.6620117595832017	0.2673931781769416	0.9017711537433225	T	T	T
0.9139233702079889	0.2672946444860924	0.8994813290655217	T	T	T
0.1684968403761390	0.4649672091668794	0.9009197219257234	T	T	T
0.4164768294314763	0.4676812520049835	0.9001056060384038	T	T	T
0.6712250846670940	0.4695314648982084	0.8968113576944555	T	T	T
0.9192305556735518	0.4682925353151542	0.8992593764604456	T	T	T
0.1698336520842966	0.6681755279531171	0.8991252970740030	T	T	T
0.4191431843419295	0.6654738800058893	0.9013387626976791	T	T	T
0.6646683199673170	0.6663078581861526	0.9032292416876366	T	T	T
0.9216083464873208	0.6690440632914157	0.8985866702538734	T	T	T
0.1700812414190939	0.8694716032117900	0.8992000050473310	T	T	T
0.4184622151774002	0.8678616163372345	0.8998845789112839	T	T	T
0.6686952890046612	0.8676551761072430	0.9033857638774327	T	T	T
0.9138246161748188	0.8642440064089799	0.8999651555480801	T	T	T
0.9973171158727923	0.9986141573658887	0.9939306697059317	T	T	T
0.2480469541324130	0.9985540631385738	0.9973476184643838	T	T	T
0.4965413118495829	0.0017746207006238	0.9971935972618950	T	T	T
0.7451337751656194	0.0002621045046180	0.00366886355580456	T	T	T
0.9905027226076466	0.1979794951516497	0.9948099597837072	T	T	T
0.2368297252930565	0.1915165762441613	0.0003800334289357	T	T	T
0.4973339766510312	0.2036971837873944	0.0099519588714545	T	T	T
0.7448880206014151	0.2017157235429543	0.9965772987123063	T	T	T
0.9989983044202261	0.4007037412995175	0.9965141136310259	T	T	T
0.2381521031048506	0.3949145298111867	0.0013141574072576	T	T	T
0.5249471650492614	0.4133190464073723	0.9897615466536526	T	T	T
0.7596107140396687	0.4047193219114504	0.9963852126164385	T	T	T
0.0064526123823483	0.6027902696680125	0.9974394880653616	T	T	T
0.2488003329770434	0.6005800511051963	0.9960335995055194	T	T	T
0.4998076324842307	0.6005181003916679	0.0047260799340433	T	T	T
0.7646729415742816	0.6059578699114679	0.9945680144474274	T	T	T
0.0070764368374939	0.8022023381199455	0.9955728355677850	T	T	T
0.2519932152857646	0.8012249158561946	0.9975064326890684	T	T	T
0.4966989270671504	0.7986306672443390	0.9966730784491016	T	T	T
0.7526684008748875	0.7993515785137860	0.0017633918616438	T	T	T
0.3564330144563533	0.3576422291737056	0.0590354159801648	T	T	T
0.4202323949674546	0.2894679782882551	0.0594443981939313	T	T	T
0.4609493767891182	0.5125170582081284	0.0937982159214815	T	T	T
0.7251887226862781	0.9839228972002586	0.1065336852780255	T	T	T
0.2671425596775305	0.5830762949383712	0.1524529898725929	T	T	T
0.8120269877685523	0.8194097678874407	0.1116912321518173	T	T	T
0.7084685716137542	0.6092081742386014	0.1616667460006767	T	T	T
0.7593220540024442	0.9254922967083571	0.1173387418406494	T	T	T
0.3830641781486347	0.5238358659791065	0.1156733647262217	T	T	T
0.3348937305707019	0.6634478813119538	0.1685656289831426	T	T	T
0.7920866944577174	0.0590521997047243	0.1279860197173355	T	T	T
0.9211047651699903	0.8563425011750883	0.1080973992517510	T	T	T
0.6097545641104690	0.5610837744988267	0.1382412392749033	T	T	T
0.7746699836693501	0.7365508585634372	0.1326800536390702	T	T	T
0.2150611601026099	0.5961568518000976	0.1173393220608610	T	T	T
0.7654813267810342	0.5687071695274206	0.1536346840433468	T	T	T

FS: structure52

```

structure52
  1.0000000000000000
    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    9

```

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
0.1628467944036991	0.0650046459631711	0.8998482970274061	T	T	T
0.4181243148010599	0.0707004198621638	0.9010137210486467	T	T	T
0.6687793615942225	0.0669760807096655	0.9012293373816005	T	T	T
0.9153671576385332	0.0649425781036888	0.9033169992326094	T	T	T

0.1672520038201080	0.2676254406408253	0.8997508935330750	T	T	T
0.4166635553116815	0.2675049268012566	0.9001778868126458	T	T	T
0.6630131821147753	0.2668006280452688	0.9014929303179048	T	T	T
0.9157147271233073	0.2673605950400482	0.8989871076665860	T	T	T
0.1703569643028339	0.4649838968905673	0.9022512743889159	T	T	T
0.4176658672804739	0.4683159014092683	0.9032212395221040	T	T	T
0.6669225152437739	0.4670163279740500	0.8989306946431489	T	T	T
0.9188091232437597	0.4674413990800522	0.8989685521384022	T	T	T
0.1688349979660519	0.6668759647538528	0.8990383071897828	T	T	T
0.4194610360432646	0.6658793047781951	0.9016940307162584	T	T	T
0.6640164676803070	0.6649398783565507	0.9001555793249540	T	T	T
0.9197288256196605	0.6676411146732781	0.8978120191501746	T	T	T
0.1689232989011528	0.8677899250340337	0.8986242997487937	T	T	T
0.4177513041570536	0.8676803526735638	0.8993834894588307	T	T	T
0.6676241083768607	0.8693533202589898	0.9012600411799918	T	T	T
0.9163862516583450	0.8661840689080454	0.8998706848709244	T	T	T
0.9960399980498023	0.9924705443430986	0.0009650928631307	T	T	T
0.2500977949457894	0.9958411751683826	0.9956639434195946	T	T	T
0.4970481685732491	0.0012524295937107	0.9960065769773996	T	T	T
0.7448216094226517	0.0018831850679196	0.0035645932733611	T	T	T
0.9957705306070024	0.2036041313881721	0.9944986067610880	T	T	T
0.2326486582494872	0.1873706658816116	0.9943417566222277	T	T	T
0.4991861714952399	0.2004685786990768	0.0074752950747211	T	T	T
0.7481921813721396	0.2035594355298032	0.9955402229481360	T	T	T
0.0013278872076800	0.4023278787314654	0.9966864909958334	T	T	T
0.2467731632676766	0.4016077220322493	0.0073172848603744	T	T	T
0.5206505480446119	0.4128464545793373	0.9969300668614055	T	T	T
0.7583710456127962	0.4041740339273429	0.9959984065238046	T	T	T
0.0048242942599325	0.6018593283868201	0.9966902219612453	T	T	T
0.2496925144135794	0.6010799826022537	0.9966163216134394	T	T	T
0.5052123637326187	0.6063539559100630	0.0050522738730935	T	T	T
0.7615771682560868	0.6048929354571060	0.9934962565020530	T	T	T
0.0042830851375832	0.7980713391160102	0.9944901859901085	T	T	T
0.2506186663308378	0.7998578433694969	0.9967966277004752	T	T	T
0.4970348205737530	0.8020696988430748	0.9960719121946232	T	T	T
0.7494522266048105	0.7991239943641533	0.9933948560774418	T	T	T
0.3368356740334473	0.3302262812395270	0.0584483901049702	T	T	T
0.4058013140867421	0.2686410259331951	0.0602398828428290	T	T	T
0.5437339909352138	0.6340441399206488	0.1005135063704519	T	T	T
0.7563451199561371	0.0056569247573631	0.0991665975516734	T	T	T
0.5015095839935135	0.8132983739706436	0.1390360592768802	T	T	T
0.9772553844436055	0.9794647620478134	0.1013144038102010	T	T	T
0.8386368380830714	0.7354221772204252	0.1382743801403097	T	T	T
0.8845081297283821	0.9980885444271123	0.1064549698316263	T	T	T
0.5182498941624828	0.6955994311218910	0.1163460997341651	T	T	T
0.5945077975547709	0.8902121725085058	0.1264462326225378	T	T	T
0.7693740922008651	0.0814696766328187	0.1149897277191198	T	T	T
0.0666527012370888	0.0425962417724043	0.1220344156499481	T	T	T
0.6495700229373321	0.6641019856185141	0.1145219537487196	T	T	T
0.8966821227339515	0.8225639401181949	0.1283621974464640	T	T	T
0.4161395752576413	0.8199536350969124	0.1244110503178842	T	T	T
0.8951363884176706	0.70211759997034976	0.1190520162705527	T	T	T

HOCC_{ad} + H_{ad} = HOCHC_{ad}

IS: structure53 + 1/2H₂

structure53					
1.0000000000000000					
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000			
-6.4258328740327499	11.1298690187710640	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	O	H		
60	2	3	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
0.1646804220962180	0.0660659156863621	0.8996462021110742	T	T	T
0.4172287038735382	0.0699649112103912	0.9013217240625085	T	T	T
0.6668938918566271	0.0677251750597356	0.9001278366818416	T	T	T
0.9157787126494800	0.0669635170596062	0.8998817265455005	T	T	T
0.1677285234805344	0.2675259882016771	0.9008828421264581	T	T	T
0.4163098979572027	0.2676864849988001	0.8998711114846375	T	T	T
0.6639071625281061	0.2671226241721616	0.9015500680175826	T	T	T
0.9162305672577797	0.2672221259065050	0.9000040865002582	T	T	T
0.1711029772106415	0.4652917508672164	0.9016604864737734	T	T	T

0.4178891572393332	0.4676028156534900	0.8993713297604026	T	T	T
0.6716303738664057	0.4694357069265759	0.8995192948585490	T	T	T
0.9210467492789012	0.4674297753519611	0.8997499215947087	T	T	T
0.1687694538836902	0.6668683498087673	0.8993642551378694	T	T	T
0.4182651307580340	0.6680832884976918	0.8988561011699974	T	T	T
0.6687606629695728	0.6660191078021159	0.9010029903491353	T	T	T
0.9180980704065458	0.6667889250489892	0.9009728001041697	T	T	T
0.1675844392638071	0.8668982426158014	0.8994327143283427	T	T	T
0.4176654313022856	0.8680912503698279	0.89982794151516928	T	T	T
0.6667541232947563	0.8671243026355119	0.9000992356253351	T	T	T
0.9154217807324657	0.8652657125783155	0.8993968030877862	T	T	T
0.9928511940730531	0.9958441335847109	0.9963008384692000	T	T	T
0.2476042430515391	0.9960020789052310	0.9963822183130547	T	T	T
0.4995896599532831	0.0029261084560511	0.9973898581538048	T	T	T
0.7470462079090776	0.0004583006307650	0.9973456684344462	T	T	T
0.9941229359665648	0.1987767077530950	0.9962750742998492	T	T	T
0.2331999527341823	0.1877574163017469	0.9979674326604888	T	T	T
0.4955162990680563	0.2045230023330867	0.0051315101948376	T	T	T
0.7467953874057217	0.2008029432449299	0.9971391934230264	T	T	T
0.0067600860877468	0.4002508093811903	0.9974465199668258	T	T	T
0.2588882719713824	0.3982750987528160	0.0055573831739314	T	T	T
0.5191738857465082	0.4145331455397719	0.9934553666749557	T	T	T
0.7610172098729828	0.4028368082104139	0.9957439953952538	T	T	T
0.0072361532887588	0.6017319322005514	0.9966439837504728	T	T	T
0.2537103225606783	0.6002824518490237	0.9967629633127510	T	T	T
0.5028393167402666	0.6065835487595100	0.9951988290509863	T	T	T
0.7602542333476738	0.6072609601990808	0.0021608168825179	T	T	T
0.0036312432759328	0.8023604097333451	0.9965422975295797	T	T	T
0.2520078023492585	0.8000618622404276	0.9971066291580538	T	T	T
0.5002444487676879	0.8020811021817064	0.9974601647586216	T	T	T
0.7502940823514207	0.8027417041465470	0.9969039157082952	T	T	T
0.3813537066900560	0.3660190404851209	0.0795682909980727	T	T	T
0.4019907055264684	0.2801162746248524	0.0549499614394152	T	T	T
0.4047736373176047	0.4199522024739178	0.1350987328447228	T	T	T
0.3404540778072621	0.5909293509680635	0.1459329601577668	T	T	T
0.7430400585182381	0.5918105418441936	0.1114951939807576	T	T	T
0.3716164758489660	0.4831355911945859	0.1365492167250152	T	T	T
0.3561043202975679	0.6302451067410119	0.1044008620576109	T	T	T
0.6402219265951770	0.5369037008824239	0.1261614019674304	T	T	T
0.7688566990027695	0.6708886949638837	0.1277325713508040	T	T	T
0.2361297853944658	0.5645816560399221	0.1565039488586956	T	T	T

TS: structure54

```

structure54
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu      C      O      H
  60     2     3     6

```

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333285	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
0.5833333333333355	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	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
0.8333333333333283	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
0.8333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1645338656020134	0.0646153130354105	0.8991997590494120	T	T	T
0.4181305381225681	0.0697107803327813	0.9019421221918589	T	T	T
0.6678093064769417	0.0676849742621898	0.9002068877369231	T	T	T
0.9173620401954730	0.0681205260052764	0.9009500521594850	T	T	T
0.1669510524487482	0.2665181567079530	0.9006444087389529	T	T	T
0.4157060045363800	0.2670391808027439	0.8997920960503435	T	T	T
0.6629566918998894	0.2667761860832373	0.9018015637249646	T	T	T
0.9161393889087882	0.2670841764542508	0.9004888570229633	T	T	T
0.1692765870946365	0.4655432169986027	0.9013148770604484	T	T	T
0.4156469355551966	0.4670544602265673	0.8995526703140005	T	T	T
0.6689523927407903	0.4686312714923946	0.9000427319674910	T	T	T
0.9189073170107898	0.4667836008918694	0.8998896399416506	T	T	T
0.1676355431409150	0.6667439879882552	0.8991211292918961	T	T	T
0.4178482200603070	0.6685888574463781	0.8986419173304901	T	T	T
0.6683484633985359	0.6662135036927747	0.9006548941202863	T	T	T
0.9166308701490348	0.6660858509137029	0.9008931911644174	T	T	T
0.1676197035783352	0.8665797645841864	0.8994551124315031	T	T	T
0.4176566628858580	0.8679614309597952	0.8998876403524915	T	T	T
0.6672811345546714	0.8675898699220612	0.9000867459969495	T	T	T
0.9156219417569167	0.8652767580699662	0.8993461189175395	T	T	T
0.9943141506142152	0.9959423938097373	0.9962250112634677	T	T	T
0.2475868432747861	0.9942762021479026	0.9968200652120007	T	T	T
0.5006148958261247	1.0023014277746833	0.9976123635338198	T	T	T

0.7497158471801827	1.0018865411001088	0.9976664192672046	T	T	T
0.99981483335905205	0.2027086507784442	0.9993508754666708	T	T	T
0.2384923380542050	0.1851429997205888	0.9967074379627100	T	T	T
0.4992104364321812	0.2032224251282392	0.0068592674945276	T	T	T
0.7482228925508821	0.2007648044200717	0.9973037713198228	T	T	T
0.0029230099048651	0.4015461825864989	0.9975158689886477	T	T	T
0.2550314960833804	0.4021564077681095	0.0030218775635078	T	T	T
0.5105668893573175	0.4110713221342697	0.9938062096255589	T	T	T
0.7574565708820176	0.4025408762212873	0.9961650249206701	T	T	T
0.0048743842710069	0.6017982878323737	0.9966270860273713	T	T	T
0.2530812296313618	0.6030391736969285	0.9961862841308912	T	T	T
0.5013751400035154	0.6070974129115332	0.9943796822683790	T	T	T
0.7559170673627438	0.6052758439822531	0.0018364464997770	T	T	T
1.0019112855503352	0.8012387085572580	0.9966267964675967	T	T	T
0.2515118204758154	0.7998557340239808	0.9971872747495449	T	T	T
0.5009960935579364	0.8029754806029631	0.9976009781027437	T	T	T
0.7499943979317752	0.8030211316855382	0.9965881972850873	T	T	T
0.3654065733326968	0.3527724234002793	0.0803193537331371	T	T	T
0.4084884283778849	0.2778996575544045	0.0561368762812249	T	T	T
0.3975572118246509	0.4126474620006155	0.1348846691298737	T	T	T
0.3460250879012658	0.5923447823908131	0.1463603697528313	T	T	T
0.7296403662612044	0.5874781404119331	0.1088335774578147	T	T	T
0.3635599724352200	0.4747988094645147	0.1364830636612762	T	T	T
0.3599311429772984	0.6316036968750696	0.1049456808525925	T	T	T
0.6275300643114872	0.5276906183962826	0.1225276160282415	T	T	T
0.7467591196603679	0.6643877772506078	0.1250030685534602	T	T	T
0.2474220142459759	0.5760338465523254	0.1606307463754015	T	T	T
0.1864953876455006	0.3116077926407853	0.0616787803661316	T	T	T

FS: structure55
 structure55
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H
 60 2 3 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
0.1689702415868606	0.0697066556978116	0.9015362772476282	T	T	T
0.4170024390507778	0.0672145439017478	0.9000195060736530	T	T	T
0.6672481501411869	0.0672229581928423	0.9000421653668910	T	T	T
0.9176525856359146	0.0671438931358554	0.8999845368487928	T	T	T
0.1678659025927748	0.2677315399271706	0.9004385230081307	T	T	T
0.4166440574471346	0.2670004348632993	0.8999612367578689	T	T	T
0.6669428290420156	0.2677612506561045	0.8997008380043260	T	T	T
0.9170134349063885	0.2675467262925642	0.8998679735783713	T	T	T
0.1685578917578368	0.4666421336350445	0.9008000031806209	T	T	T
0.416222390895600	0.4666453282494402	0.9002316137178271	T	T	T
0.6656561322070830	0.4680814617264659	0.9020631678864914	T	T	T
0.9174761342628531	0.4683201039601055	0.8993413903302667	T	T	T
0.1665205859597852	0.6676579307893103	0.8992698633281992	T	T	T
0.4168718813604163	0.6672882635437893	0.8994040925640835	T	T	T
0.6679179408989677	0.6662643861776637	0.9011014457671428	T	T	T
0.9142150420547400	0.6662465619622692	0.9015865218018966	T	T	T
0.1669034641633659	0.8670104785293735	0.8996987235596061	T	T	T
0.4171443632698786	0.8673177561182698	0.8999964236942973	T	T	T
0.6666458987125889	0.8668182423438920	0.8997211090353033	T	T	T
0.9175261875440076	0.8672209365798719	0.8995223183571843	T	T	T
0.9989044720487149	0.9992493082779524	0.9970396588521463	T	T	T
0.2507361068870789	0.9998630252520624	0.9969088423409352	T	T	T
0.5009851095006252	0.0000756015286958	0.9974959711551034	T	T	T
0.7499377175787346	0.0004198918760954	0.9971579033408521	T	T	T
0.99787752774441618	0.1994492986367128	0.9965543290686699	T	T	T
0.2452225851071287	0.1955544940541256	0.0031226977294483	T	T	T
0.5033967164998646	0.1988466663038136	0.9962952665253410	T	T	T
0.7512941163784314	0.2005102292772338	0.9969082633271454	T	T	T
-0.0009411479999215	0.4019761304447467	0.9961567139170233	T	T	T
0.2452813414164108	0.4041337616945440	0.0005471546308458	T	T	T
0.5038011360247893	0.3998809653504131	0.9992926693758445	T	T	T
0.7523275495581723	0.3998243076223743	0.9957107748917700	T	T	T
0.0023090106657955	0.6023033682528396	0.9967158252826234	T	T	T
0.2499115080916857	0.6035746980530385	0.9965374911513363	T	T	T
0.4999299811074117	0.6038160645798470	0.9953778062338793	T	T	T
0.7514976205486074	0.6022695595511339	0.0036538153575027	T	T	T

0.0022809025566256	0.8025637695509105	0.9967451524869457	T	T	T
0.2508409017531062	0.8014250839619864	0.9978126837802563	T	T	T
0.5000306945751873	0.8013496383347695	0.9974957424121180	T	T	T
0.7510820944702912	0.8029850369967521	0.9963027312314338	T	T	T
0.3140067764706858	0.3795140873654914	0.1119358949799675	T	T	T
0.3352348385412023	0.3342915920425140	0.0575122924961840	T	T	T
0.4254902738992536	0.4815586271465681	0.1403678887837521	T	T	T
0.3239298613265862	0.6335685529975649	0.1619014872149162	T	T	T
0.7289588312352377	0.5944967033677089	0.1072703425063090	T	T	T
0.3817489633949780	0.5303503181437688	0.1576613379457296	T	T	T
0.3292463711262532	0.6627836242699420	0.1186679718107515	T	T	T
0.6206639988610636	0.5528742370182057	0.1192190491646569	T	T	T
0.7715770841816069	0.6769758821739413	0.1222551627683854	T	T	T
0.2234368429427939	0.6113032676301218	0.1764498694182445	T	T	T
0.2089577611371136	0.3340188126076412	0.1388936176805465	T	T	T

HOCC_{ad} + H_{ad} = HOCCH_{ad}

IS: structure53 + 1/2H₂

TS: structure56

```

structure56
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

```

Cu      C      O      H
60      2      3      6

```

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333285	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
0.5833333333333355	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	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
0.8333333333333283	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
0.8333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1650142682539965	0.0648968626026169	0.8999528028391803	T	T	T
0.4176091398596004	0.0680746244660777	0.9021402166959336	T	T	T
0.6666591934065144	0.0657355122033658	0.9003071489204941	T	T	T
0.9158908793717876	0.0652092638077696	0.9000144726641531	T	T	T
0.1686004583126779	0.2662567620598436	0.9017609380483810	T	T	T
0.4171249130324033	0.2659474174296960	0.8996420239782564	T	T	T
0.6641210090554714	0.2651873824179654	0.9012410701594126	T	T	T
0.9159932808191934	0.2654648146642553	0.9002666853206827	T	T	T
0.1681230866262160	0.4632283005761397	0.9024046484677778	T	T	T
0.4145598070236651	0.4669088388749763	0.8980429754781631	T	T	T
0.6710447514407468	0.4672515478305505	0.8995573522742921	T	T	T
0.9167827371787715	0.4642220922576323	0.9010535728390349	T	T	T
0.1664762775565889	0.6645517626853058	0.8994573588415546	T	T	T
0.4161026779864968	0.6666429686061142	0.8988873602176978	T	T	T
0.6673433150063388	0.6638122945954594	0.9012943269706749	T	T	T
0.9165847626488464	0.6647147492671773	0.9010173331116320	T	T	T
0.1669624259650859	0.8653330076078043	0.8993600367019696	T	T	T
0.4162921333493187	0.8659536012269041	0.8997393334490809	T	T	T
0.6656277553082418	0.8650604278835766	0.9000537841823421	T	T	T
0.9150253345206925	0.8636992513856442	0.8994626963763371	T	T	T
0.9948744473593923	0.9943647342778711	0.9963317341658098	T	T	T
0.2469716745159549	0.9926337530951463	0.9967089089095007	T	T	T
0.4984153772195342	0.9970707433218010	0.9973548776378417	T	T	T
0.7471180557416631	0.9972151813244390	0.9975403231083270	T	T	T
0.9962115588169426	0.1960215835453039	0.9963532428632108	T	T	T
0.2402645662463883	0.1871935703221233	0.9991204646588222	T	T	T
0.4972812236144563	0.1970148092751815	0.0062864020722543	T	T	T
0.747611096985088	0.1961882064964481	0.9977311774713209	T	T	T
0.0034557461596499	0.3965036899782955	0.9979238795835293	T	T	T
0.2546410048664857	0.3947261086637084	0.0100025408253791	T	T	T
0.5105097247940815	0.4145783149384958	0.9894292835660430	T	T	T
0.7522972512410863	0.3949917583845394	0.9997427006371173	T	T	T
0.00223053842447441	0.5966843796409975	0.9968085649937235	T	T	T
0.2497976952230990	0.5974745242317981	0.9971710360657146	T	T	T
0.4983729932878763	0.6048217705817307	0.9949394245767265	T	T	T
0.7570807552528601	0.6035215663910496	0.0020169621959971	T	T	T
1.0019238345346160	0.7995802356415463	0.9964864476174542	T	T	T
0.2488733600985679	0.7962511534172739	0.9972899348290358	T	T	T
0.4984306019393089	0.7991365658393464	0.9977822790791550	T	T	T
0.7493488508428212	0.8004969986081278	0.9967989809067100	T	T	T
0.3847208245059437	0.3648007075010015	0.0772068756331742	T	T	T
0.4153221512216536	0.2809349343409216	0.0543620291533343	T	T	T
0.4330569783992501	0.4275831301058499	0.1316023249227835	T	T	T
0.3318205720484927	0.5776452657257831	0.1488146315278785	T	T	T

0.7405729990479309	0.5873889431550469	0.1064827234738921	T	T	T
0.3871921725292962	0.4810415270323998	0.1376410864427924	T	T	T
0.3498901972844974	0.6214126589567027	0.1086578088003521	T	T	T
0.6363022767313719	0.5320645813923157	0.1208294700726348	T	T	T
0.7681775678441723	0.6660777626128600	0.1238206791300278	T	T	T
0.2233894392901271	0.5391229347554923	0.1549556055069205	T	T	T
0.5920554484049708	0.3016761161440739	0.05874333170134279	T	T	T

FS: structure57

```

structure57
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      3      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
0.1665060310525178	0.0680668836787255	0.9007193880041324	T	T	T
0.4173696184417984	0.0690530813166127	0.9005792181673163	T	T	T
0.6673816313034439	0.0677256121789784	0.8999162949704568	T	T	T
0.9163607915926993	0.0671842024305193	0.9000389959175706	T	T	T
0.1692697138658762	0.2670980723848242	0.9018096603345107	T	T	T
0.4165056025447107	0.2681143573983478	0.8997646224466167	T	T	T
0.6652177711649395	0.2672021081778155	0.9007195591914766	T	T	T
0.9174780883316606	0.2674141863831588	0.8996304973206568	T	T	T
0.1710928150211353	0.4652958167974238	0.9014339044674673	T	T	T
0.4185527567694239	0.4669139958476238	0.8998101356661269	T	T	T
0.6700546899615619	0.4692485257653114	0.9002809386373678	T	T	T
0.9201126794600969	0.4678650442022011	0.8993906783711331	T	T	T
0.1678946574662091	0.6675213351791657	0.8991462423005130	T	T	T
0.4180075195097198	0.6672694358852664	0.8989120298271712	T	T	T
0.6692411108618538	0.6665427375280321	0.9009228779645773	T	T	T
0.9171634690346273	0.6668952646306142	0.9013828174251032	T	T	T
0.1674494973010481	0.8675534995382556	0.8995875231174465	T	T	T
0.4174430431472311	0.8675960306770635	0.8996954310324513	T	T	T
0.6669524359478316	0.8673103942813762	0.8999442012998813	T	T	T
0.9163849011753642	0.8662557024940575	0.8994882016914293	T	T	T
0.9946029792191069	0.9972390639964904	0.9966517973874699	T	T	T
0.2484241048496894	0.9971305661507278	0.9967811909927294	T	T	T
0.5002418787527050	0.0022505831855439	0.9966576995032056	T	T	T
0.7480796861379494	0.0008959808219830	0.9973335647278391	T	T	T
0.9967639262437427	0.1994681374722218	0.9962885709296359	T	T	T
0.2381897842163715	0.1886423473857993	0.0025106386095760	T	T	T
0.4957298656805937	0.2043024158140185	0.0004177575577610	T	T	T
0.7485559478686293	0.2008930747354091	0.9963650712561221	T	T	T
0.0054958443626384	0.4010102216998993	0.9964943304819203	T	T	T
0.2574306762936879	0.3998268075844073	0.0036388693979765	T	T	T
0.5178534674005079	0.4107427209298982	0.9957733109016058	T	T	T
0.7599867148381109	0.4028274456686321	0.9954816300473548	T	T	T
0.0060879271696741	0.6020093828612660	0.9968492753154521	T	T	T
0.2527172697170603	0.6022647300954933	0.9956516183871327	T	T	T
0.5025227485047109	0.6055289934098377	0.9949019560658273	T	T	T
0.7585350143800501	0.6063355374879854	0.0029831431515471	T	T	T
0.0031768053193503	0.8027463912067910	0.9969837537746636	T	T	T
0.2518168933273217	0.8011190855265528	0.9972022615303220	T	T	T
0.5007963360840729	0.8018298096760542	0.9974017222485025	T	T	T
0.7505978305355788	0.8029077683841112	0.9969470706299904	T	T	T
0.3663522479079934	0.3625569934776563	0.0715682924693193	T	T	T
0.4088701964471392	0.2753771073065837	0.0650071241297281	T	T	T
0.3877709402053762	0.4162945013053879	0.1292266566246653	T	T	T
0.2983088769972289	0.5790510943315335	0.1430004994658859	T	T	T
0.7187973446209232	0.5810056856666482	0.1110671083510500	T	T	T
0.3470880694889274	0.4730193875475690	0.1308664845567648	T	T	T
0.3390552654883119	0.6362435026391575	0.1077061734525747	T	T	T
0.6126526667188524	0.5287422924493019	0.1232593178330565	T	T	T
0.7502158659110413	0.6587384598015812	0.1305308546040406	T	T	T
0.1897569319548927	0.5448410781865439	0.1392187916738749	T	T	T
0.4464988305699786	0.2499314904161543	0.10784616190739363	T	T	T

HOCHC_{ad} + H₂O_{ad} + e⁻ = CCH_{ad} + H₂O + OH⁻

IS: structure58

structure58

```

1.000000000000000
10.2813325984523996      0.000000000000000      0.000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.000000000000000
0.000000000000000      0.000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      5      10
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
0.1690465659302756 0.0696605185974778 0.9008879162056902 T T T
0.4169814035444590 0.0674104999876383 0.8998359189078599 T T T
0.6669970009871419 0.0671277311624124 0.8997057236090148 T T T
0.917222218075717 0.0668287503155945 0.8995855446138890 T T T
0.1671600333290244 0.2673168185630193 0.9002554238360397 T T T
0.4165591331512285 0.2671833111219214 0.9004601778110264 T T T
0.6670004288080871 0.2675841685871912 0.8997972213022845 T T T
0.9165810330769875 0.2674097267029008 0.8999689584486351 T T T
0.1682324894898753 0.4662963605292233 0.9005645696370829 T T T
0.4160522174420885 0.4662131782542387 0.9000084240584917 T T T
0.6637360374686425 0.4659017919727632 0.9003248764489906 T T T
0.9173605852284427 0.4681707830337781 0.8992372258628308 T T T
0.1667905293645814 0.6676226525200628 0.8995284478574884 T T T
0.4169006109447107 0.6676294924412981 0.9006032678941024 T T T
0.6677463948895649 0.6679768434144850 0.9003998896425587 T T T
0.9176473092645639 0.6675178483304877 0.8992653694565697 T T T
0.1673554756780850 0.8676597363273781 0.8993743103246872 T T T
0.4179872402839034 0.8667759335628535 0.9008582561379612 T T T
0.6664749877825545 0.8655252544900159 0.9023729209195205 T T T
0.9158709328237885 0.8663835131335768 0.9005401711452646 T T T
0.0007893994705432 0.0009657554102779 0.9960030365617066 T T T
0.2506203823323073 0.0001542446377985 0.9967709552915454 T T T
0.5010379001191398 0.0015977072299394 0.9968079417094065 T T T
0.7512373935113537 0.0026682850315811 0.9963711845369467 T T T
0.9978357341000181 0.1997558867448664 0.9964968209569485 T T T
0.2465960639839709 0.1967278923736498 0.0025731686636490 T T T
0.5032694265659273 0.1997076070111147 0.9965095761899325 T T T
0.7508461338879140 0.2011727910109465 0.9970589139389318 T T T
0.9977994408227128 0.4017541577513623 0.9962899245397084 T T T
0.2441345250133450 0.4036027099988586 -0.0001773560049503 T T T
0.5072115604359687 0.4031714095841416 0.0017174284331651 T T T
0.7520652710621832 0.4014129713450197 0.9963297343342461 T T T
0.0004105462046777 0.6017198884953949 0.9974204088802602 T T T
0.2474396257522588 0.6018401187951343 0.9960908150616731 T T T
0.5014871922919970 0.6015474801445799 0.9949074359809178 T T T
0.7532839460320009 0.6010020101116565 0.9951453119360815 T T T
0.0028150405886088 0.8009530354881667 0.9965657710150708 T T T
0.2490438386106262 0.8013250864476249 0.9972401165186920 T T T
0.4978974486840648 0.8006319596222826 0.0006825776077559 T T T
0.7527186247522820 0.8010218555075955 0.0015555868859078 T T T
0.3012998040381007 0.3732614647354295 0.1120598857939406 T T T
0.3344584914392948 0.3354269558930289 0.0574539073016790 T T T
0.4022466473699791 0.4727925052555721 0.1443235524048339 T T T
0.2936810633091342 0.6063665391589084 0.1849312714583179 T T T
0.7123092419403909 0.5875753066288883 0.1472186568294626 T T T
0.7594180174121267 0.7986066775571597 0.1126577175933462 T T T
0.5023285981371496 0.8043777124399579 0.1184772832801580 T T T
0.3512314445535764 0.5144811985347822 0.1653586202799103 T T T
0.3631983910751748 0.6820058195962111 0.1622265944139874 T T T
0.1936690618135645 0.5833315193077988 0.1694885761458023 T T T
0.1917700685743870 0.3213098507315899 0.1353597658271571 T T T
0.7472628833341165 0.5536241004983657 0.1144285494794707 T T T
0.6008164697819385 0.5379620323309346 0.1457460912786843 T T T
0.8600178107668247 0.8618516158761995 0.1241969622207130 T T T
0.7481996091387199 0.7180817395309844 0.1268634465739289 T T T
0.5169052002864486 0.8849582018669757 0.1236732296972549 T T T
0.6041077419624004 0.8119352215440827 0.1217941069772162 T T T

```

```

TS: structure59
structure59
1.000000000000000
10.2813325984523996      0.000000000000000      0.000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.000000000000000
0.000000000000000      0.000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      5      10
Selective dynamics

```

Direct					
0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333285	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
0.8333333333333285	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	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
0.8333333333333285	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
0.8333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1700179883967791	0.0696658530572094	0.8999455037402767	T	T	T
0.4177471796965335	0.0682915231909860	0.8993120125570186	T	T	T
0.6678794733662200	0.0678489368790735	0.8991577845329458	T	T	T
0.918935926354078	0.0679244105469365	0.8988950611499646	T	T	T
0.1687115062448257	0.2685943488142328	0.9005320557704976	T	T	T
0.4172864868637092	0.2677672863746778	0.8993766695508824	T	T	T
0.6676346793210115	0.2684681581333521	0.8997012378575917	T	T	T
0.9170135058404724	0.2679895154564775	0.8997014385538903	T	T	T
0.1694848439804773	0.4671023286251810	0.9008398495738843	T	T	T
0.41777893880252	0.4688987081193047	0.9025477947437395	T	T	T
0.6642757326953513	0.4670192754087949	0.9002469503644049	T	T	T
0.9179166804059590	0.4688384784273864	0.8990520965602755	T	T	T
0.1674352023400445	0.6678912039840341	0.8992766252779772	T	T	T
0.4193985153187825	0.6684114938665857	0.9021787212984619	T	T	T
0.6653481869971500	0.6678131914402954	0.9031417752863077	T	T	T
0.9174389802458619	0.6678339362040404	0.8991710531604085	T	T	T
0.1680838043162183	0.8677857298190473	0.8988466319656893	T	T	T
0.4187233027044925	0.8672356602771032	0.9003914884857025	T	T	T
0.6682746867773588	0.8666119000426136	0.9021052405619159	T	T	T
0.9158869972658792	0.8659878616717336	0.9000896795300264	T	T	T
0.0040959758104933	0.0030992063547473	0.9942627630287786	T	T	T
0.2522441123906772	0.9989419849493756	0.9961915606619413	T	T	T
0.5026936730014668	0.0039709662431804	0.9957220057420952	T	T	T
0.7545316617838010	0.0059087114465797	0.9950356293666544	T	T	T
0.9977235315716156	0.1998619526075132	0.9957244826296614	T	T	T
0.2504205091799463	0.1934158417233292	0.9997507198230194	T	T	T
0.5052408298106741	0.1994572073677503	0.9963371554511226	T	T	T
0.7520155218565562	0.2021337395492324	0.9969694436379084	T	T	T
0.9974894860742011	0.4025272299532147	0.9960825999018538	T	T	T
0.2405767880288607	0.4025156554304842	0.0003609563076878	T	T	T
0.5072867624439610	0.3990155171761458	0.9987639422127754	T	T	T
0.7533190591719289	0.4022027237033114	0.9961708113426437	T	T	T
0.0015784759631998	0.6028075672626443	0.9974000541028899	T	T	T
0.2469028095007104	0.6041316230156255	0.9960740247018619	T	T	T
0.5032117701962092	0.6076435732550323	0.0023726798547585	T	T	T
0.7549500905647760	0.6011031220690626	0.9956729537189942	T	T	T
0.0049566515721509	0.8014282015462015	0.9959704351093420	T	T	T
0.2504061994409169	0.8021710998759416	0.9968497124774129	T	T	T
0.5024570094751226	0.8076241510164975	0.0001269630767524	T	T	T
0.7594444399762564	0.8060515972768484	0.0019247682513139	T	T	T
0.3035086697091103	0.3865080422266942	0.0966415531834457	T	T	T
0.3358244124434008	0.3259197226078782	0.0580496755329563	T	T	T
0.4541951368962387	0.5674939811003838	0.0928991395820873	T	T	T
0.2807319880481244	0.6561658082841646	0.1483301671309576	T	T	T
0.6973772610877943	0.6174298389989872	0.1543410361123634	T	T	T
0.7859801843994700	0.8232584518855716	0.1072860641350530	T	T	T
0.5481100326286494	0.8580377517292063	0.1152787660257246	T	T	T
0.3947331897127526	0.6011519367173008	0.1122418018932336	T	T	T
0.3660722826211752	0.7389301447497729	0.1436362222516294	T	T	T
0.2046591179254448	0.6517801272560106	0.1191284896234705	T	T	T
0.2532748212430391	0.3953312329236383	0.1394389367048348	T	T	T
0.7386264611883816	0.5700466694586125	0.1366235449323057	T	T	T
0.5947330219488832	0.5871037519054241	0.1332568384931605	T	T	T
0.8893975248235079	0.8840394233668007	0.1167908957448844	T	T	T
0.7641085876123198	0.7419785101202407	0.1278601127799774	T	T	T
0.5808052178607567	0.9436316903909158	0.1147212665861517	T	T	T
0.6413324710549942	0.8520802122324226	0.1188482615023503	T	T	T

FS: structure60

structure60					
1.0000000000000000					
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	10		
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
0.1645051522112292	0.0670933466030895	0.9023339005290031	T	T	T
0.4180891743294544	0.0690442514102852	0.9006990126448012	T	T	T
0.6694143584010016	0.0663165740005678	0.9015442181435827	T	T	T
0.9168258782400903	0.0664880563898831	0.9009355606818010	T	T	T
0.1680953383792091	0.2674134076887398	0.8993022558774116	T	T	T
0.4158769497086052	0.2666800299284550	0.9005337054821360	T	T	T
0.6633448078856091	0.2661599382802258	0.9007791626365196	T	T	T
0.9153316466619823	0.2676812123939491	0.8986247088312230	T	T	T
0.1682974416383078	0.4661299421542701	0.9007189166094445	T	T	T
0.4178954384640584	0.4687314207818424	0.9018474871070112	T	T	T
0.6656420387676776	0.4660875019261420	0.8995552892139996	T	T	T
0.9183361830429267	0.4674931155095641	0.8993972910720187	T	T	T
0.1682058926703557	0.6671521487787528	0.8992219996277883	T	T	T
0.4191937190689206	0.6664468244091765	0.9011937282174661	T	T	T
0.6646124712720087	0.6653467838398923	0.9004069831528020	T	T	T
0.9191157176988031	0.6675248993712634	0.8984539272772688	T	T	T
0.1691456140194256	0.8678464513921869	0.8990464476897864	T	T	T
0.4176371554588779	0.8672563993721998	0.8992426069721566	T	T	T
0.6691497200889708	0.8684051596749437	0.9012260452528198	T	T	T
0.9181320488679087	0.8674722406270794	0.9000649278952153	T	T	T
0.9966254815211332	0.9962966633903376	0.0007799946333755	T	T	T
0.2494902100814218	0.9969131466050879	0.9963745589777130	T	T	T
0.5005218807349150	0.0000878129807909	0.9966830554011324	T	T	T
0.7499249736207670	0.0023341976818020	0.0018719198475346	T	T	T
0.9993722767424371	0.2058751290517494	0.9931294943312116	T	T	T
0.2385177245773041	0.1956071712721472	0.9990035899020765	T	T	T
0.5021147863811506	0.1985402727104862	0.0026287784865567	T	T	T
0.7507873497583594	0.2019016578856060	0.9960641302292718	T	T	T
0.0019181981430434	0.4019487468301800	0.9970669616977130	T	T	T
0.2501924413941088	0.3993408405823494	-0.0003342572102893	T	T	T
0.5134789170853422	0.4105144836606607	0.9971676434804624	T	T	T
0.7567391645588366	0.4026706170173457	0.9959340189514821	T	T	T
0.0036452289587777	0.6017710675423193	0.9972006992735877	T	T	T
0.2484021565461318	0.6003724689889381	0.9961096917830482	T	T	T
0.5020144637721705	0.6049425619687635	0.0042676551090668	T	T	T
0.7592303611970412	0.6033182770124530	0.9945344739169305	T	T	T
0.0040090891084465	0.7994970166551815	0.9954719715965290	T	T	T
0.2509289809503893	0.8000866861049784	0.9967133187097775	T	T	T
0.4996330350181498	0.8026979586915128	0.9957985578176579	T	T	T
0.7504321641235030	0.7964585091867157	0.9941995355435216	T	T	T
0.3565595961553799	0.3277780085944532	0.0729273938624303	T	T	T
0.4209477940100977	0.2647917901475225	0.0597982774275836	T	T	T
0.5143347021494437	0.6183839356467902	0.1015759393008609	T	T	T
0.3790437562941306	0.7329379336606987	0.1481127707036318	T	T	T
0.8030177797844572	0.7803991713945899	0.1347056646873007	T	T	T
0.8697937572538955	0.9951626635180649	0.0804732727489121	T	T	T
0.6190461393085051	0.9615867061689721	0.1570572939281533	T	T	T
0.4573119061107030	0.6570942396814196	0.1193812746097163	T	T	T
0.4619391187085783	0.8181179847916368	0.1526835174066937	T	T	T
0.3100839933705560	0.7354511867621272	0.1173084996439259	T	T	T
0.3321839465710480	0.3689643498643463	0.1124214953525002	T	T	T
0.8810825373914720	0.7619781143793556	0.1230734869510092	T	T	T
0.6208769334686755	0.6724816185467301	0.1149199861566723	T	T	T
0.9359156488006488	0.0725804698072667	0.1005245815524825	T	T	T
0.8386965463910278	0.8636849089147403	0.1190070577432837	T	T	T
0.6002241371639357	0.0257289434198862	0.1442971952334209	T	T	T
0.7021249521514643	0.9708851077424291	0.1297181117852199	T	T	T

HOCHC_{ad} + H_{ad} = HOCH₂C_{ad}

IS: structure55 + 1/2H₂

TS: structure61

```

structure61
1.0000000000000000
10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
-6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      3      7

```

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333285	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
0.5833333333333355	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F

0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	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
0.8333333333333283	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
0.8333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1688719180072445	0.0692396773971192	0.9017204009297685	T	T	T
0.4170620853213795	0.0669410342393237	0.9003684928981193	T	T	T
0.6673029706703580	0.0668492148831415	0.9001801398535004	T	T	T
0.9172743720785721	0.0662515607739544	0.8998091099156287	T	T	T
0.1686083281830388	0.2676244660999454	0.9007326057358648	T	T	T
0.4180636509695112	0.2666569636554146	0.8998205756988198	T	T	T
0.6677210259339683	0.2673917182548119	0.9000416416901955	T	T	T
0.9180183504294888	0.2674366257089251	0.9003239633525272	T	T	T
0.1677303952839712	0.4669038463955409	0.8999120058177803	T	T	T
0.4164993903587728	0.4661980080299752	0.9006119516405332	T	T	T
0.6663727249430221	0.4677109801481241	0.9018934387247688	T	T	T
0.9177330294250645	0.4677603868605472	0.8996708611380400	T	T	T
0.1668933134380256	0.6673119260126632	0.8994868977111775	T	T	T
0.4166785225910388	0.6666261846266394	0.8997786235554123	T	T	T
0.6686763132615078	0.6662070050747441	0.9006975139996372	T	T	T
0.9147744404998800	0.6661476485138874	0.9013584622650322	T	T	T
0.1674285366823559	0.8667903464447908	0.8997192107851020	T	T	T
0.4174803156638706	0.8671736231327929	0.8998663394564125	T	T	T
0.6667357222461234	0.8663046266806586	0.8997627493969980	T	T	T
0.9179100436781081	0.8667958609964688	0.8995717393281787	T	T	T
0.9997723310607587	0.9983971790929623	0.9973001646178866	T	T	T
0.2516670016345428	0.9995082531551834	0.9971938962837024	T	T	T
0.5014021412939583	0.9994866079671487	0.9977456442693187	T	T	T
0.7499611841742034	0.9992630025410371	0.9972897880868790	T	T	T
0.9962779070677933	0.1961357079806811	0.9963021473468134	T	T	T
0.2458721429427539	0.1955804801785264	0.0037620508207307	T	T	T
0.5038260142436197	0.1981471493750882	0.9971209757506319	T	T	T
0.7517823787489687	0.1997550810709870	0.9971733094404432	T	T	T
0.0005295712193931	0.4015855865923546	0.9975610121546118	T	T	T
0.2445807859013173	0.4028293037094284	0.9982046834009617	T	T	T
0.5058367034761138	0.3997790040043448	0.9988956665846691	T	T	T
0.7535226586787799	0.3992526274420568	0.9957325363344073	T	T	T
0.0025601658866090	0.6021306957989436	0.9965358592900975	T	T	T
0.2503143746447068	0.6024974067489733	0.9975843704480828	T	T	T
0.5037922787703006	0.6044316443034388	0.9950027991698869	T	T	T
0.7532916537181287	0.6020893458750582	0.0033320502406791	T	T	T
0.0036454346771295	0.8022328611594320	0.9968432035169155	T	T	T
0.2521690086813337	0.8006746732269371	0.9978840133511403	T	T	T
0.5004327709398740	0.8006191304870293	0.9973529329170487	T	T	T
0.7525974141885009	0.8029685663462305	0.9961704652333697	T	T	T
0.3020050689997625	0.3943543256955755	0.1023320999587798	T	T	T
0.3407443451016191	0.3347555921265540	0.0562359102495684	T	T	T
0.4166629187731204	0.4996095906577061	0.1289871472904991	T	T	T
0.3310989503758768	0.6603142295160410	0.1573651147973382	T	T	T
0.7246143228759626	0.5943392336278516	0.1068161697783399	T	T	T
0.3765625341099718	0.5512439808408820	0.1458264977488740	T	T	T
0.3364790760714098	0.6953765130758038	0.1156029547093764	T	T	T
0.6154031413794453	0.5580788433644567	0.1159530668656624	T	T	T
0.7713852768596235	0.6770717920067653	0.1218832861539382	T	T	T
0.2332421966018176	0.6410488225196700	0.1739893192814176	T	T	T
0.2091731128863205	0.3408474296402575	0.1350252971005151	T	T	T
0.2049773040252653	0.4370513402383787	0.0662746974379722	T	T	T

FS: structure62

structure62

1.000000000000000

10.2813325984523996

-6.4258328740327499

0.0000000000000000

Cu C O H

60 2 3 7

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

0.1683285975226423	0.0688498791775589	0.9011014534547723	T	T	T
0.4171242581683623	0.0674620298933009	0.8999799740980431	T	T	T
0.6673993415308220	0.0671763554000517	0.9000726925473587	T	T	T
0.9176465387650539	0.0672280866079416	0.9002322441018963	T	T	T
0.1681192315946550	0.2673584060346476	0.9002399907000694	T	T	T
0.4168826482022349	0.2672630919387841	0.8995860974164590	T	T	T
0.6670620280692224	0.2674428084944336	0.8997507455722763	T	T	T
0.9177195445390515	0.2673544151831624	0.8999616879773932	T	T	T
0.1687062478174792	0.4662447009018731	0.9007066478362900	T	T	T
0.4168518521512081	0.4667342328730980	0.8993644573206786	T	T	T
0.66714023424441561	0.4686807636119887	0.9019675917602303	T	T	T
0.9179837733829821	0.4678823078335759	0.8996926283747122	T	T	T
0.1672916954011964	0.6674121014684127	0.8994356534104614	T	T	T
0.4173215928091603	0.6668051109427413	0.8993501973118210	T	T	T
0.6682519822582114	0.6659447083234074	0.9015251662213499	T	T	T
0.9151038319791747	0.6662482515695292	0.9017622317367983	T	T	T
0.1674373568158669	0.8671744396635411	0.8998100218790462	T	T	T
0.4175166639821136	0.8672887919987379	0.8999414929898667	T	T	T
0.6669469623519176	0.8667933445609703	0.8997447968659078	T	T	T
0.9174745425685116	0.8669162454617929	0.8995742185057931	T	T	T
0.999222682495698	0.9991841106086358	0.9969526565857989	T	T	T
0.2509291496608917	0.9996796106606740	0.9971698536799040	T	T	T
0.5010847049637960	0.0004732535163315	0.9972373162914573	T	T	T
0.7502223763684738	0.0006213219535588	0.9971453530771294	T	T	T
-0.0007937544820763	0.2002527080854686	0.9972359258993149	T	T	T
0.2466945550264610	0.1953111255787087	0.0026567773068479	T	T	T
0.5021590322930556	0.2001951527797257	0.9968251271849439	T	T	T
0.7510746304109464	0.2003794234856340	0.9968652120425168	T	T	T
0.0016841760317762	0.4013637047024026	0.9966608208928660	T	T	T
0.2501484047123176	0.4024283732553019	0.0019321594595890	T	T	T
0.5033916609757828	0.4006859126452054	0.9982956160885935	T	T	T
0.7531614788050602	0.3996078495824269	0.9959743416549374	T	T	T
0.0038383511695057	0.6016066284560673	0.9968398315450960	T	T	T
0.2506298606019562	0.6019389007079390	0.9966588926159454	T	T	T
0.4992163615180761	0.6024915176559170	0.9958754432371818	T	T	T
0.7530570505528258	0.6022301405019189	0.0040144531622216	T	T	T
0.0030958194716147	0.8026540922791603	0.9966833903311514	T	T	T
0.2516049254690844	0.8011751541861323	0.9977139268329756	T	T	T
0.5006308497431449	0.8008612215742452	0.9971951782589661	T	T	T
0.7512654727756110	0.8028117248674002	0.9964660873976693	T	T	T
0.3535815370761548	0.3405125800246557	0.1267743093119798	T	T	T
0.3369672967591786	0.3326144971312419	0.0567772152696165	T	T	T
0.4607061468021559	0.4581432539665397	0.1507307331288670	T	T	T
0.369645696430529	0.6253075888943178	0.1506441562274314	T	T	T
0.7376434747181382	0.5894554057499934	0.1045450172181376	T	T	T
0.4154751063586964	0.5110691091880546	0.1496928463244473	T	T	T
0.3711375989989016	0.6527570684801558	0.1072560161098567	T	T	T
0.6319225360993752	0.5371293540615897	0.1214598216102610	T	T	T
0.7761826256927790	0.6683032443960368	0.1238211039642466	T	T	T
0.2732158468463413	0.6088580177923339	0.1676423439884715	T	T	T
0.3931321605355322	0.2798333759042101	0.1434276633644244	T	T	T
0.2433124829637609	0.3106129538369573	0.1491100320368949	T	T	T

HOCHC_{ad} + H_{ad} = HOCHCH_{ad}

IS: structure55 + 1/2H₂

TS: structure63

structure63		
1.000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu	C	O	H
60	2	3	7

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333285	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333285	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
0.5833333333333355	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.8333333333333284	0.3333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823901	F	F	F
0.3333333333333286	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
0.8333333333333283	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
0.8333333333333285	0.9333333333333300	0.8029049805823901	F	F	F
0.1675205095500681	0.0679251594232356	0.9005107619836207	T	T	T
0.4185551116917499	0.0697692344725140	0.9019138519137343	T	T	T
0.6672959774087788	0.0670125112346464	0.9000338761839639	T	T	T
0.9167384278866395	0.0668088971834568	0.9001364652705172	T	T	T
0.1682677508584452	0.2665502192112501	0.9005906743313656	T	T	T
0.4182283822828171	0.2677522561738115	0.90014408864449933	T	T	T
0.6645171089662723	0.2661985166605917	0.9003035887853180	T	T	T

0.9167866463050910	0.2669449285446264	0.8998830979519953	T	T	T
0.1651507013004404	0.4673225960817373	0.8995842040717835	T	T	T
0.4159721138778491	0.4674965370731721	0.8995048171888340	T	T	T
0.6653857881606379	0.4673784269122980	0.9028658298202117	T	T	T
0.9136839897291226	0.4661319972717667	0.9003690883932243	T	T	T
0.1656059496641215	0.6669628493114504	0.8996747063060732	T	T	T
0.4159171422551738	0.6677261605161868	0.8994515333128655	T	T	T
0.6671278302238838	0.6663392870726823	0.9016140012815292	T	T	T
0.9143826288494448	0.6662244721688544	0.9011291645630546	T	T	T
0.1668929429118581	0.8671597075081043	0.8996134149675505	T	T	T
0.4164701566113627	0.8670724999162549	0.8995993061073442	T	T	T
0.6660368128396986	0.8667413871173532	0.9000998952582515	T	T	T
0.9160013977837315	0.8662153909558973	0.8998178595619298	T	T	T
0.9991736217895165	0.9998275954850672	0.9968857156615794	T	T	T
0.2488283389766418	0.9968876732058330	0.9967813880691295	T	T	T
0.5002267692637165	0.9981848850445456	0.9969294021069701	T	T	T
0.7502653716029820	0.0003466659197026	0.9974790205248836	T	T	T
0.0008705252374717	0.2001493433232960	0.9967041035496536	T	T	T
0.2481326356056359	0.1976382064557179	0.0007314299149392	T	T	T
0.5030704617501648	0.1972443562531341	0.0044810973475473	T	T	T
0.7520744989070982	0.1987679617366384	0.9969628955435824	T	T	T
0.9990767076910317	0.4001604128561843	0.9971494777094341	T	T	T
0.2442961868491688	0.4025663133180198	0.9963545858544071	T	T	T
0.4936700588367974	0.4082001031389584	0.9978197166329745	T	T	T
0.7500094243353216	0.3970158216773726	0.9985846538184197	T	T	T
0.0004912372925439	0.5999252035012295	0.9963349291394370	T	T	T
0.2491661093801905	0.6016019134320477	0.9978253116295956	T	T	T
0.4978487070722675	0.6050086068771452	0.9965287353871009	T	T	T
0.7515653706632038	0.6031179094790472	0.0027880660543676	T	T	T
0.0014760302105359	0.8024540991098351	0.9965846150143528	T	T	T
0.2494532314167669	0.7996953152139963	0.9970465188148506	T	T	T
0.4997777917372875	0.8013593180432520	0.9976960055142534	T	T	T
0.7502132348517606	0.8030740254577545	0.9971270092340787	T	T	T
0.4267699897316475	0.3308161231110168	0.1133669567603744	T	T	T
0.4180848204596699	0.2696519391172378	0.0599284483967155	T	T	T
0.5412763256320927	0.3754614904336178	0.1566052570459300	T	T	T
0.5091365341210559	0.5831307665375128	0.1747900387936104	T	T	T
0.7735521956162750	0.6025885027602986	0.1075059970292153	T	T	T
0.5246021546067237	0.4297066615406163	0.1838535437333185	T	T	T
0.4567079915833962	0.5863256219620252	0.1369663699464271	T	T	T
0.7192610707038127	0.5180591266112227	0.1212217371866888	T	T	T
0.7179910445663192	0.6371241532721627	0.1278413233958572	T	T	T
0.4884521187197274	0.6271965238876085	0.2067318584948434	T	T	T
0.3329221263276181	0.3442752442015400	0.1262449817222130	T	T	T
0.6118509848626820	0.2948290713088463	0.0548323384055802	T	T	T

```

FS: structure64
structure64
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu      C      O      H
  60      2      3      7
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
0.1681185934891352 0.0682374759594423 0.9011932760550490 T T T
0.4173512299080442 0.0680475722072821 0.9004691426841415 T T T
0.6681090114686916 0.0672943341975692 0.8999325127860696 T T T
0.9171576176101409 0.0670010427230410 0.9000056094250082 T T T
0.1688760108483665 0.2661100647249679 0.9010923635553705 T T T
0.4169212377587535 0.2673949231677996 0.9001124353363820 T T T
0.6654416526424813 0.2670884662490221 0.9003439787597840 T T T
0.9171173591791399 0.2672819625815732 0.8996460366897059 T T T
0.1667840819818688 0.4680755790339042 0.8988309010373856 T T T
0.4179346831109443 0.4667351070955076 0.8998630654729901 T T T
0.6658306985985701 0.4677684706909951 0.9024442134035495 T T T
0.917030784070638 0.4676321393968973 0.8994497665231831 T T T
0.1670003677441421 0.6676601515024881 0.8995900392847271 T T T
0.4173476205086703 0.6678723182140430 0.8992138587339191 T T T
0.6685645269462013 0.6665947275369735 0.9013061813818531 T T T
0.9150400886769200 0.6662006010294670 0.9012931977065949 T T T
0.1669935365883480 0.8668684045564551 0.8995388870148104 T T T
0.4172682325085671 0.8673527908912425 0.8998628944914956 T T T
0.6668177711862211 0.8668187872358634 0.9000441599302759 T T T

```

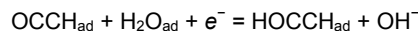

0.4944495742035855	0.2014467116657314	0.0005701044378910	T	T	T
0.7479820704905434	0.2004157568358309	0.9964283755765918	T	T	T
0.9985309706566240	0.3987608743965651	0.9955259852789239	T	T	T
0.2559624341104367	0.3962169891683799	0.9972983130753120	T	T	T
0.5138822940787691	0.4163430055216111	0.0008929447320796	T	T	T
0.7526079136154138	0.4024518637557009	0.9981488993591866	T	T	T
0.0015554657648735	0.6013551702472455	0.9968864074304519	T	T	T
0.2521584499884710	0.5997606934058480	0.0040485585212906	T	T	T
0.5071999120189972	0.6071403300527649	0.9950176198979362	T	T	T
0.7588732121462129	0.6078858208179980	0.9961678802375430	T	T	T
0.0026008639179054	0.8017578945372890	0.9970297157377601	T	T	T
0.2517192838351930	0.8014933662486640	0.9969701051762384	T	T	T
0.5022674394183113	0.8039420238714142	0.9961205534106482	T	T	T
0.7511500156765081	0.8026450183691480	0.9971340332921484	T	T	T
0.3407358455363863	0.3462046354684460	0.0734257858937965	T	T	T
0.3982489574649647	0.2658241917202843	0.0699855151067581	T	T	T
0.2998311260801358	0.3828104079800027	0.1200255850642975	T	T	T
0.2619585444556733	0.5729635381871105	0.1039210798199619	T	T	T
0.2749264916867132	0.5015364732747186	0.1131640287470787	T	T	T
0.3466090522743811	0.6420631801957554	0.1237107419909336	T	T	T
0.4210545249359753	0.2362350567110525	0.1150231515853477	T	T	T
0.5724650139541509	0.3338798467758224	0.0453680013757349	T	T	T

```

FS: structure66
structure66
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
    -6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
    0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
  Cu      C      O      H
    60      2      2      4
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
0.1685281285748534      0.0698838797407357      0.9011621079239734      T      T      T
0.4162689229293093      0.0672847233230406      0.8995565576566286      T      T      T
0.6676353823523306      0.0676491782859190      0.8999009743754668      T      T      T
0.9172763070173104      0.0672674747824166      0.8996078167315857      T      T      T
0.1688796257030771      0.2678296784513869      0.9020784563898737      T      T      T
0.4165529166138482      0.2684844533043377      0.9013904387297978      T      T      T
0.6670266506336908      0.2682789951946550      0.8995012734914297      T      T      T
0.9168423330794959      0.2677437588925128      0.8993974491277430      T      T      T
0.1690237126984526      0.4682673764459867      0.9021381047248926      T      T      T
0.4166970783357040      0.4673474191038248      0.9006828765997943      T      T      T
0.6645968229958877      0.4669571277634421      0.9010663210031465      T      T      T
0.9173355986293751      0.4681748010483217      0.8995593902720622      T      T      T
0.1678808601598397      0.6663542589098497      0.9014799597593268      T      T      T
0.4151236558640449      0.6669562100226208      0.9007488758349279      T      T      T
0.6681734148427032      0.6677522731662529      0.8992202769264175      T      T      T
0.9175465176062216      0.6675690987866573      0.8996758869926675      T      T      T
0.1663515913256852      0.8670743148890924      0.8995982429226397      T      T      T
0.4169839098960403      0.8674545728387126      0.8995136601665058      T      T      T
0.6675916361280596      0.8673634653124883      0.8995853707862883      T      T      T
0.9174565410260336      0.8673436783945689      0.8995850290699302      T      T      T
-0.0012651427571170      0.0000380155984215      0.9966776769719056      T      T      T
0.2498118044290432      0.9983063265692466      0.9965963200139112      T      T      T
0.5010206856550934      0.0007957319339416      0.9971569372422070      T      T      T
0.7502938104552114      0.0010746850955653      0.9971544801625138      T      T      T
0.9951654332890151      0.1988829198095698      0.9955544887701326      T      T      T
0.2496224629766337      0.1938992608904484      0.0034615654954181      T      T      T
0.5045093437736614      0.1994711763610810      0.9949683676141321      T      T      T
0.7498882119297162      0.2009322763273466      0.9968933650554549      T      T      T
0.9961756243620997      0.4003205221582977      0.9958675788868591      T      T      T
0.2458670497302169      0.4024030732852715      0.9979231285398407      T      T      T
0.5057030399401437      0.4060442677229365      0.0025029254672733      T      T      T
0.7506168213584770      0.4017372236994801      0.9967151919583181      T      T      T
-0.0009462150080311      0.6019341455965025      0.9968073901305404      T      T      T
0.2516970501624293      0.6050962852409341      0.0029050936399893      T      T      T
0.5074639929613753      0.6075477323706301      0.9947475790455038      T      T      T
0.7529297057015266      0.6039120401500484      0.9971618171150503      T      T      T
0.0008604325449768      0.8017113752282216      0.9970770816658289      T      T      T
0.2510556934600988      0.8031510576585362      0.9967077714874030      T      T      T
0.5034466399947819      0.8049307494679625      0.9960629948994796      T      T      T
0.7523976923329179      0.8030493119440663      0.9973156700142198      T      T      T
0.3640763981263022      0.3400901650072294      0.0757643889240604      T      T      T
0.3360197453424450      0.2282632018649629      0.0996446721652549      T      T      T

```

0.2858862266008869	0.3893012913687408	0.0928818407686568	T	T	T
0.2700695874144821	0.5928985419073548	0.1050068146433139	T	T	T
0.2882915541558408	0.5241171513773173	0.1097348239366614	T	T	T
0.3591068062922904	0.6637884851275360	0.1210340779860297	T	T	T
0.2526248472841987	0.1856355756311237	0.1371813875663116	T	T	T
0.4276421268604267	0.2080322388746519	0.0991032894164607	T	T	T



IS: structure67
 structure67
 1.000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
 Cu C O H
 60 2 3 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
 0.1671382519757150 0.0676521162626679 0.9003350507373731 T T T
 0.4178744596832188 0.0694583856133618 0.9009764965409710 T T T
 0.6673913494333541 0.0673624842923508 0.8998282249842368 T T T
 0.9160389498047504 0.0662212167352702 0.8995110591996827 T T T
 0.1678061889784356 0.2663244704905613 0.9005809452125041 T T T
 0.4167035167839815 0.2681973176971169 0.9002490986026294 T T T
 0.6657290300602742 0.2671042245547468 0.9005832143840289 T T T
 0.9166920277168152 0.2668827598102737 0.8989152718921944 T T T
 0.1703221268147163 0.4670636272827883 0.9012396114729929 T T T
 0.4192633640846920 0.4669978666351325 0.9002964176673171 T T T
 0.6673849695458568 0.4673380086433285 0.9003450660554220 T T T
 0.9196138949975645 0.4689117816250362 0.9005617795282900 T T T
 0.1675415476915054 0.6654456326155002 0.9026755023090096 T T T
 0.4166728163300186 0.6670520107408179 0.9001014612793188 T T T
 0.6693132260410162 0.6678415295484214 0.8988203203002906 T T T
 0.9213092282108815 0.6668177859741180 0.9007834106887384 T T T
 0.1683708063164138 0.8670932715356945 0.8993997492426212 T T T
 0.4177794468578788 0.8678003856925081 0.8994058257303533 T T T
 0.6676538715866702 0.8670208779641624 0.8997413572120116 T T T
 0.9169971112318170 0.8657402933697779 0.8992674323022546 T T T
 0.9962904309254408 0.9972618997987693 0.9962091947779821 T T T
 0.2493760791041773 0.9972992690589498 0.9967201175608539 T T T
 0.5016972405875596 0.0026884152308401 0.9970461816161146 T T T
 0.7497153398974571 0.0006741472894820 0.9971910638332493 T T T
 0.9969395254285515 0.1981858961901972 0.9953793709405739 T T T
 0.2407539282034375 0.1902875241897687 0.0011209830048958 T T T
 0.4981919128848203 0.2047615389443429 0.0008200681266039 T T T
 0.7493048746290804 0.2003743554069373 0.9961432473067593 T T T
 0.0017573926327791 0.3977134962757840 0.9944578309180667 T T T
 0.2544563517282175 0.3962527747450592 0.9978890959530273 T T T
 0.5146535924647190 0.4109117232501157 0.0008335818460240 T T T
 0.7552798646479703 0.4019871011964705 0.9956463196173021 T T T
 0.0039407876993205 0.6013772017993139 0.0032658125299263 T T T
 0.2567930660996320 0.5999224431763637 0.0001361733765174 T T T
 0.5084921235215943 0.6054782113417690 0.9946890942840800 T T T
 0.7574993074877914 0.6063800225151700 0.9957458790520071 T T T
 0.0034448542372560 0.8027490678327475 0.9963466780555101 T T T
 0.2550964164556171 0.8031732791110636 0.9965301881770761 T T T
 0.5036223740373992 0.8032770901339606 0.9963192754090519 T T T
 0.7521317349786057 0.8022755607297525 0.9971897062227545 T T T
 0.3456066333689620 0.3436024687280296 0.0749853823107102 T T T
 0.4102526050165444 0.2720286453845068 0.0668012323184046 T T T
 0.3025437800702856 0.3838708300983957 0.1189558234265758 T T T
 0.2695227950098126 0.5776245159049954 0.1124071095188550 T T T
 0.0123863126837339 0.5919611018877122 0.1066319201453740 T T T
 0.2791679981662750 0.5036854140200246 0.1175004645746165 T T T
 0.367205255577733 0.6458739692956235 0.1233670100823247 T T T
 0.4444929594342536 0.2438215762987274 0.1095313517777965 T T T
 0.1045246285004209 0.5881382224071018 0.1166466644189404 T T T
 0.0262271611133063 0.6663429713442366 0.1249875690731140 T T T

TS: structure68
 structure68
 1.000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

```

-6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu    C    O    H
60    2    3    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
0.1657259881305018    0.0669322063887898    0.9003314501446339    T    T    T
0.4168694010146668    0.0694486241995225    0.9012438584864698    T    T    T
0.6660852729658463    0.0667936127454790    0.8998628625512881    T    T    T
0.9147525041384437    0.0653216782292458    0.8995353297470475    T    T    T
0.1660121735604040    0.2648761943596983    0.8996754534008241    T    T    T
0.4156233013936462    0.2679827192773904    0.9004864101479650    T    T    T
0.6643641964316849    0.2665478946723807    0.9009164967844415    T    T    T
0.9153794982378196    0.2659337902437936    0.8987299083945067    T    T    T
0.1708509629904831    0.4665378298626880    0.9013404039704268    T    T    T
0.4202966137954365    0.4671527517941602    0.8995262382618449    T    T    T
0.6681665552824823    0.4675709871290338    0.9004019426211252    T    T    T
0.9198780197695333    0.4685158152317191    0.9005868052886598    T    T    T
0.1684378416990830    0.6640597252778199    0.9038475081383285    T    T    T
0.4158179692441558    0.6659367998043677    0.9005799475064805    T    T    T
0.6693497082604254    0.6674329157085419    0.8988742101851702    T    T    T
0.9225814809087352    0.6664733630335302    0.9009646941931468    T    T    T
0.1678473031113410    0.8667086071040510    0.8993824331885633    T    T    T
0.4170006864117396    0.8673189002290911    0.8994061557595312    T    T    T
0.6666125518707268    0.8663319920491191    0.8996626501396027    T    T    T
0.9161409246577932    0.8649016187079892    0.8992493800786384    T    T    T
0.9935606001448628    0.9956370441071245    0.9961069655098133    T    T    T
0.2476623461623808    0.9965889518580564    0.9969986880422566    T    T    T
0.4995319866641367    0.0024165400934605    0.9970957434736143    T    T    T
0.7476653465333950    1.0000129355566842    0.9971533178355020    T    T    T
0.9945907922051770    0.1969640296578527    0.9951649117315762    T    T    T
0.2367568523288198    0.1875618045824518    0.0015132256963034    T    T    T
0.4942689568347879    0.2050976662820987    0.0025823280801223    T    T    T
0.7460204627229965    0.1991091759793155    0.9962721229024133    T    T    T
0.9992691221332526    0.3953985851008923    0.9938577385293814    T    T    T
0.2536970347489825    0.3935316922586945    0.9956598483620039    T    T    T
0.5170468836979036    0.4123817937738885    0.0006367779899171    T    T    T
0.7540808967120242    0.4010362151972885    0.9958467002423345    T    T    T
0.0039957613432414    0.6001492596036964    0.0039187330728921    T    T    T
0.2584694418975815    0.5973141236742410    0.0030959821729461    T    T    T
0.5102427992907191    0.6051540853271049    0.9945628723217842    T    T    T
0.7592865002625712    0.6065280278992585    0.9958932771290425    T    T    T
0.0034760164982098    0.8020817562181762    0.9965849933305823    T    T    T
0.2545616045087489    0.8026455787742810    0.9966764882170496    T    T    T
0.5031379057941575    0.8031687297256913    0.9961423981555391    T    T    T
0.7512799750120011    0.8016569976086292    0.9972475973994216    T    T    T
0.3455025323482577    0.3533899286877257    0.0704407279662509    T    T    T
0.4029028038700111    0.2748589993618988    0.0669761292461221    T    T    T
0.3155988727747249    0.3954799169811506    0.1206782377372233    T    T    T
0.2681343568425261    0.5608409266091466    0.0998877483286543    T    T    T
0.0213430051122808    0.5819835754128516    0.1046997712909489    T    T    T
0.289068860840077    0.4744426040874689    0.1110919097170824    T    T    T
0.3564951179721594    0.6313625646800395    0.1167883571535632    T    T    T
0.4326232919477548    0.2481358853941717    0.1113990417634039    T    T    T
0.1132823006697222    0.5738220724017403    0.1108493779561654    T    T    T
0.0392432053046933    0.6540590516786079    0.1271131829339134    T    T    T

```

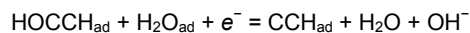
FS: structure69

```

structure69
1.0000000000000000
10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
-6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu    C    O    H
60    2    3    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
0.1656134339074481	0.0675646654993630	0.9004828043477591	T	T	T
0.4168543179415270	0.0696608873920399	0.9010295204705017	T	T	T
0.6661029422081178	0.0672122652363468	0.8998311311631709	T	T	T
0.9145969437924388	0.0658188652000533	0.8995420895074399	T	T	T
0.1662021296380937	0.2657917426696062	0.8998914581315189	T	T	T
0.4156063699460142	0.2685370954305499	0.9005696860965305	T	T	T
0.6644019238370198	0.2669526720816673	0.9008526098824420	T	T	T
0.9157384830908870	0.2665762625456057	0.8988166254863432	T	T	T
0.1710696420851598	0.4667659126017851	0.9017740670562047	T	T	T
0.4201446686610320	0.4675863729021852	0.8996195685932524	T	T	T
0.6680068595540606	0.4677991010612583	0.9005531817038220	T	T	T
0.9201197898858621	0.4690707085485781	0.9007333255804165	T	T	T
0.1683997095846742	0.6643096497133169	0.9039883442104283	T	T	T
0.4159377853225938	0.6662920743114974	0.9007228501617244	T	T	T
0.6692131550613785	0.6677888910527767	0.8989886235424528	T	T	T
0.9225646793204368	0.6668289539224705	0.9010769909750165	T	T	T
0.1678399924027920	0.8670777785643400	0.8994255962999305	T	T	T
0.4169726040946659	0.8673316544080729	0.8993682449885614	T	T	T
0.666931112409040	0.8669636882232458	0.8996838991707214	T	T	T
0.9162088059832245	0.8653329898351639	0.8992046330816309	T	T	T
0.9933464609344409	0.9964548578017945	0.9962062289279853	T	T	T
0.2475767677462523	0.9976924663635277	0.9968461838895823	T	T	T
0.4996413469799382	0.0032367459641738	0.9969513575350308	T	T	T
0.7477222888279119	0.0007518225497934	0.9973253880979464	T	T	T
0.9941940097868783	0.1977084609056809	0.9953824571323867	T	T	T
0.2355238677010916	0.1879566981965682	0.0017156996047381	T	T	T
0.4938740007136871	0.2053481676687313	0.0022451978365197	T	T	T
0.7460246390252052	0.1999565301505230	0.9963164445251015	T	T	T
0.9990252048693744	0.3958778420480543	0.9940111610722981	T	T	T
0.2545697291974666	0.3947232773443042	0.9964279252133265	T	T	T
0.5184574090163168	0.4136162863888382	0.0011502522601590	T	T	T
0.7543599231897428	0.4018015441966012	0.9958473227032465	T	T	T
0.0028549383214699	0.6013547331084549	0.0043280283545233	T	T	T
0.2586660484249186	0.5989757337475318	0.0030630008828200	T	T	T
0.5102103111676372	0.6059757755331553	0.9950362354897941	T	T	T
0.7589476183662283	0.6075965423138421	0.9960468294657786	T	T	T
0.0031134932108102	0.8031362784949028	0.9965987439250694	T	T	T
0.2543776161547558	0.8041557133003068	0.9964175537331482	T	T	T
0.5033809617621959	0.8044411532541683	0.9960442888870087	T	T	T
0.7512874083112829	0.8025515634826240	0.9973783034960457	T	T	T
0.3437339369447395	0.3501777427587663	0.0692363132662781	T	T	T
0.4039154214680574	0.2738323188867953	0.0668614133264901	T	T	T
0.3168326457682938	0.3896696699341731	0.1232363671229600	T	T	T
0.2622931144155586	0.5649123401733196	0.0961057664831354	T	T	T
0.0208244503255308	0.5812648428244804	0.1027860132743796	T	T	T
0.2891066174035331	0.4552494586451836	0.1145914061405312	T	T	T
0.3499845059113060	0.6348316619329519	0.1138940829098613	T	T	T
0.4334436095772921	0.2476325670532687	0.1114804840401108	T	T	T
0.1175851819396437	0.5767896857412359	0.1077241772274759	T	T	T
0.0327603497996074	0.6495984455228545	0.1272150304796821	T	T	T



IS: structure70

```

structure70
1.0000000000000000
10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
-6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      6      12

```

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
0.1654601612216158	0.0673731125332246	0.9005625184998858	T	T	T
0.4165771364984722	0.0690862857493328	0.9008080609993701	T	T	T
0.6663573793145653	0.0672620359760912	0.8997178542335654	T	T	T
0.9148821878839727	0.0659957661040725	0.8997311823156038	T	T	T
0.1670314049492980	0.2654934685952453	0.9005531070906189	T	T	T
0.4154421953264870	0.2679623201100071	0.9005396728033512	T	T	T
0.6642201773430543	0.2667112741322379	0.9009992957785266	T	T	T
0.9160646486011078	0.2662485252305282	0.8991345552782406	T	T	T
0.1708753114869125	0.4655154209878910	0.9020917682483083	T	T	T
0.4186844821567174	0.4662552496797865	0.8995851260789980	T	T	T
0.6674844436971227	0.4674223192928965	0.8998104866904162	T	T	T
0.9187373835159020	0.4673708507638446	0.8990427122174952	T	T	T
0.1688879944694472	0.6657369232119997	0.9009854376694925	T	T	T
0.4152927499835061	0.6657574209264940	0.9007259168040033	T	T	T
0.6684969606279743	0.6681731649669936	0.9001287512323306	T	T	T
0.9204868931587011	0.6678288300877970	0.8986975429357288	T	T	T
0.1675012718730441	0.8674627563943120	0.8992533783550273	T	T	T
0.4174084046731233	0.8676993292821461	0.8993492538261184	T	T	T
0.6671396573400826	0.8656694555063291	0.9016131539568402	T	T	T
0.9141343558883807	0.8645243767643211	0.9007739303057382	T	T	T
0.9931217300135374	0.9960525785383377	0.9961024164119405	T	T	T
0.2468970139032581	0.9961141753744996	0.9970279938630706	T	T	T
0.4987869667696812	0.0017314121941854	0.9967037085289014	T	T	T
0.7469754910611092	0.0010023946066809	0.9968465765879857	T	T	T
0.9939510567919612	0.1978830128186936	0.9958446379758198	T	T	T
0.2348475935448819	0.1867438464107007	0.0024537084513905	T	T	T
0.4934123602689110	0.2039702078002101	0.0013057435142546	T	T	T
0.7456045882350021	0.1997784655673565	0.9966187292104993	T	T	T
0.9988621865362358	0.3975883143235504	0.9947193592154534	T	T	T
0.2543170051949032	0.3947786311274071	0.9991696183645937	T	T	T
0.5202063691571382	0.4128730658410892	0.9996335888495121	T	T	T
0.7578452183517020	0.4033642974655962	0.9965947237464846	T	T	T
0.0029885977977196	0.6008769619822520	0.9969824899939009	T	T	T
0.2509886682868205	0.5984450549043924	0.0016429183078022	T	T	T
0.5040117753537714	0.6030502704870395	0.9941524300721145	T	T	T
0.7605835443105834	0.6054392841419761	0.9948575721851830	T	T	T
0.0038373400867386	0.8006682075333821	0.9968762764916145	T	T	T
0.2509730626091635	0.8007114510422759	0.9967961121299286	T	T	T
0.4990154443857079	0.8015067640161396	0.9967189436941156	T	T	T
0.7494787221250274	0.7999794560110927	0.0035475096534608	T	T	T
0.3499042505692238	0.3521495456529820	0.0696955628283673	T	T	T
0.4061392891171527	0.2732887356926512	0.0660502064628895	T	T	T
0.3461541151016190	0.3987677427323078	0.1274193047864587	T	T	T
0.2270368315351869	0.5435930808942729	0.1098975554517281	T	T	T
0.6615173562058116	0.5601161667023019	0.1488537816022771	T	T	T
0.746622350368764	0.7855939156817277	0.1152808981307419	T	T	T
0.5835430430935333	0.8956737042176971	0.1520580912089563	T	T	T
0.2880629230100633	0.74391681304441209	0.1613157178183955	T	T	T
0.3021791889664773	0.4529314089833965	0.1232650637200138	T	T	T
0.1179535109767780	0.4928694769177197	0.1129773917720362	T	T	T
0.2536572664659007	0.6234929798006119	0.1326957628946608	T	T	T
0.4374247412424820	0.2474333418655354	0.1104471572315956	T	T	T
0.5518523221898326	0.5036128728274024	0.1485280623688353	T	T	T
0.7005943416619748	0.5291903509660821	0.1162160726738674	T	T	T
0.7122917180270611	0.6998064891205453	0.1286432612315781	T	T	T
0.8516509383102593	0.8332079953562698	0.1279099926958133	T	T	T
0.6405440738351695	0.8542030018547816	0.1417755569386555	T	T	T
0.6012969935475139	0.9485496087563708	0.1159970768993587	T	T	T
0.3999045932297356	0.8022581551135552	0.1594283933017943	T	T	T
0.2433001669079219	0.7776419345592425	0.1333221506148362	T	T	T

TS: structure71
structure71
1.0000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-6.4258328740327499 11.1298690187710996 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
Cu C O H
60 2 6 12
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
0.1674470256280110	0.0684590245293123	0.9005430562264412	T	T	T
0.4165139781355678	0.0687579315714032	0.9005511792161339	T	T	T
0.6658391066805588	0.0671224697545602	0.8993966631829986	T	T	T

0.9155647281281868	0.0662670922821644	0.8991849857918809	T	T	T
0.1672326926433767	0.2656543032196230	0.8999932074968813	T	T	T
0.4161328463251245	0.2671344447372211	0.8993724993265779	T	T	T
0.6651938151830299	0.2674760291479880	0.9008154901053966	T	T	T
0.9159155095645649	0.2665251282750065	0.8992493935418411	T	T	T
0.1690656004178730	0.4674761022397564	0.9009940613178596	T	T	T
0.4182531535966436	0.4678720973833184	0.9005075571766934	T	T	T
0.6686176183638627	0.4688083998850468	0.8985126308487651	T	T	T
0.9186900150702745	0.4685905286660023	0.8986166722104079	T	T	T
0.1698357687917800	0.6669335229049650	0.9007159442372573	T	T	T
0.4164436844501819	0.6644129827399312	0.9036880276334796	T	T	T
0.6648325756540234	0.6672956546130744	0.9036740086017536	T	T	T
0.9196289101571116	0.6686828048472875	0.8986586989662148	T	T	T
0.1672664534002995	0.8679165051319752	0.8989223014836318	T	T	T
0.4177334214127493	0.8674548992055218	0.8992170655056846	T	T	T
0.6677910247010220	0.8657785198790199	0.9011827173197101	T	T	T
0.9138501146513368	0.8648224502114338	0.9006632280897724	T	T	T
0.9990871101049049	0.0010257638759948	0.9948895897253422	T	T	T
0.2487662773506700	0.9977703164800661	0.9970753570447438	T	T	T
0.4997125922769292	0.0021032893180315	0.9969294458780598	T	T	T
0.7485632102994242	0.0028744495763581	0.9958153251200699	T	T	T
0.9931536808344382	0.1975482879089553	0.9956962737605431	T	T	T
0.2445928915122362	0.1912808762575203	0.0024738476894371	T	T	T
0.4977384375944190	0.2011234190274656	0.0006123102916002	T	T	T
0.7466401722082078	0.2001483714454538	0.9971632153056609	T	T	T
0.9967797730384430	0.3989770265846838	0.9946273973795591	T	T	T
0.2402590410367637	0.3968169174946334	0.9964088816466578	T	T	T
0.5197772673757121	0.4061733664926004	0.9935934560209968	T	T	T
0.7579620426982283	0.4026753852036827	0.9960331187413521	T	T	T
0.0015331276407574	0.6021013321935036	0.9961604163586499	T	T	T
0.2472490561409877	0.6023184149366163	0.0027212368964166	T	T	T
0.5043159733586227	0.6025083472767577	0.0037902952565393	T	T	T
0.7611006491688938	0.6047362527031303	0.9954622421299263	T	T	T
0.0044107459303538	0.8020385003615610	0.9964521597434410	T	T	T
0.2516839413542066	0.8035236067832687	0.9957922287117585	T	T	T
0.5010166018017357	0.8039666637447255	0.9961672826875105	T	T	T
0.7535464983236259	0.8043637465439186	0.0039460742236041	T	T	T
0.3519588809306370	0.3664196245348164	0.0575325763678780	T	T	T
0.4034445099905699	0.2922915803079145	0.0716602257983775	T	T	T
0.4613010062636385	0.5291943994417814	0.0937713951077695	T	T	T
0.2390872467269750	0.5943071432696201	0.1068040470896456	T	T	T
0.7097936636752336	0.6224752176611060	0.1585832072189909	T	T	T
0.7764082412208172	0.8268020804122606	0.1097182914472661	T	T	T
0.6175404896112631	0.9404752861034426	0.1506446594337012	T	T	T
0.3156799357728625	0.8049543615065627	0.1509297951133081	T	T	T
0.3809892063192314	0.5434909311757907	0.1095822274110943	T	T	T
0.1373627383765975	0.5375760169556547	0.1207250229584910	T	T	T
0.2673550074503722	0.6773129022521792	0.1254208264894198	T	T	T
0.4584938707075750	0.2830227185166864	0.1133058745956604	T	T	T
0.6072905943735407	0.5762257272092630	0.1373076671905369	T	T	T
0.7694540653868380	0.5899245045010880	0.1408077848806098	T	T	T
0.7571850602731987	0.7473423940955892	0.1306866248457561	T	T	T
0.8823689145599549	0.8851993147602906	0.1165771724219008	T	T	T
0.6698178208885681	0.8959773189257970	0.1387783018011154	T	T	T
0.6443015142770722	0.0001053161944010	0.1171880433084261	T	T	T
0.4287564018784343	0.8554517347358791	0.1525815174322356	T	T	T
0.2849094625913769	0.8457076376303072	0.1205846450876470	T	T	T

FS: structure72

```

structure72
  1.000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015

```

```

Cu C O H
60 2 6 12

```

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
0.1680056106292246	0.0678525577246182	0.8987102993492992	T	T	T
0.4193319541158004	0.0680919881216565	0.9020266841072917	T	T	T
0.6666107308893389	0.0647187713463100	0.9045633060322754	T	T	T
0.9148151743280798	0.0662018008319191	0.9001250585454208	T	T	T
0.1682849635700312	0.2670503686025036	0.8996513173314458	T	T	T
0.4167381898590331	0.2674374218900997	0.8993372888068787	T	T	T
0.6648662005790562	0.2669356126601690	0.9003535679866536	T	T	T

0.9147731254653070	0.2668727033766921	0.8990809739391245	T	T	T
0.1686215857658007	0.4648882112600445	0.9006927939866372	T	T	T
0.4179334487022873	0.4680344568461480	0.9026348204824337	T	T	T
0.6650123400633748	0.4663588912453621	0.8995278842433152	T	T	T
0.9175773692975986	0.4675058309022101	0.8989120990981472	T	T	T
0.1677358822007635	0.6668731076026111	0.8983922418371275	T	T	T
0.4189050652849198	0.6663636660104969	0.9004626696135972	T	T	T
0.6648427756995000	0.6668609801977263	0.9028125065597356	T	T	T
0.9182334544962895	0.6667732886993817	0.8984857100618671	T	T	T
0.1681332441437887	0.8670681949054589	0.8981239135693101	T	T	T
0.4186982722398523	0.8689028984040977	0.9004311760708243	T	T	T
0.6713162145294609	0.8685779602542806	0.9033753579814777	T	T	T
0.9144436358647040	0.8636706625288024	0.8995242695888438	T	T	T
0.0013548164200649	0.9975494601596617	0.9927646498634058	T	T	T
0.2464614218348032	0.9956879416618618	0.9949821146947391	T	T	T
0.4967154092598869	0.9999431364375743	0.0038039126855440	T	T	T
0.7544086854673328	0.0044899721825996	0.0047160042115061	T	T	T
0.9978975206326580	0.2024574948669774	0.9933022582171297	T	T	T
0.2414773860557254	0.1890786341735267	0.9971885307826419	T	T	T
0.4996433015506961	0.2029845978572633	0.9999110439000128	T	T	T
0.7492343205407972	0.2038642310828974	0.9966490220860031	T	T	T
0.9992620386990074	0.4015072530159109	0.9961978484949562	T	T	T
0.2439829235625645	0.4007164056843501	0.0014936284322437	T	T	T
0.5158214448560038	0.4073268443083572	0.9982459053135928	T	T	T
0.7559148391574051	0.4023091716190790	0.9960635395236813	T	T	T
0.0022708341896694	0.6007582738406437	0.9971789886542379	T	T	T
0.2466098619122310	0.6007701601355652	0.9946171005773596	T	T	T
0.498559166734554	0.6036859030398992	0.0028287532765974	T	T	T
0.7585438051024517	0.6015058818433543	0.9947561501944256	T	T	T
0.0046189816972557	0.7987325034948460	0.9954856226329813	T	T	T
0.2473703127810751	0.7979231931367234	0.9951435133663207	T	T	T
0.4995320926938155	0.8024535814340533	0.9945710021353870	T	T	T
0.7561297436632607	0.7997115695596261	0.0007354054351781	T	T	T
0.3292472645430329	0.3365020863909297	0.0571070343762852	T	T	T
0.4014317380645757	0.2800612684518076	0.0720655555642747	T	T	T
0.4989898123570658	0.6201468841451334	0.1004876672975232	T	T	T
0.3226839751445695	0.7118073773255884	0.1402818789276675	T	T	T
0.7763727706092074	0.8110387571014840	0.1028786247530962	T	T	T
0.8182182397716864	0.0171467818520446	0.0997125281021217	T	T	T
0.6871460557240545	0.1050800743442409	0.1696344859377006	T	T	T
0.4461470177201006	0.9614777619445818	0.1095995043499909	T	T	T
0.4294018635761226	0.6482033337842086	0.1158036310070225	T	T	T
0.2316485627955910	0.6769128886812233	0.1144507136873908	T	T	T
0.3711372899881445	0.7993508808694215	0.1320642340619910	T	T	T
0.4368133769592873	0.2531498211710335	0.1141930588215354	T	T	T
0.6017084806012308	0.6872367972940644	0.1106747731634782	T	T	T
0.8646173120668689	0.8070641277881272	0.1159823880797903	T	T	T
0.7998568531570935	0.9040745786294804	0.1070267632156505	T	T	T
0.9262884728912789	0.0738512563292362	0.1011082850288583	T	T	T
0.7472446075111669	0.0748810820737187	0.1450818643108862	T	T	T
0.7322871563360063	0.1898914440974725	0.1590399035993133	T	T	T
0.5371717146408883	0.0238647003207106	0.1355155162603578	T	T	T
0.3637548120712716	0.9772228462521384	0.1166536902544776	T	T	T

HOCCH_{ad} + H_{ad} = HOCHCH_{ad}

IS: structure57 + 1/2H₂

TS: structure73

```

structure73
1.0000000000000000
  10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
   -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu   C   O   H
60   2   2   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
0.1662951563284362	0.0684178618568736	0.9009670773502388	T	T	T
0.4181439228160655	0.0703932991277732	0.9008463088082312	T	T	T
0.6670345666433228	0.0675371189590492	0.9000928822349458	T	T	T
0.9157758500572685	0.0669439693399160	0.9000225713356129	T	T	T
0.1681241202842584	0.2667735440653291	0.9014015360653764	T	T	T
0.4162770397732268	0.2689389761556296	0.9008840924772969	T	T	T

0.6656295546272986	0.2677878587113934	0.9008358477893040	T	T	T
0.9170619908921778	0.2676881333588517	0.8993932487594176	T	T	T
0.1715638462859852	0.4658959969983352	0.9011602071942568	T	T	T
0.4186498159007933	0.4656307298307764	0.9008641670865870	T	T	T
0.6684552987807230	0.4681302136601423	0.9003577382459401	T	T	T
0.9200497177639266	0.4681350003799501	0.8991928490643822	T	T	T
0.1691106720717121	0.6676549398460847	0.8993188983380042	T	T	T
0.4186413242203222	0.6668122812882098	0.8997478444609391	T	T	T
0.6675647529737914	0.6672064583007623	0.8998943229334474	T	T	T
0.9202150107153674	0.6679580646919181	0.8992753381421285	T	T	T
0.1678346307642047	0.8681201233260903	0.8996467542061117	T	T	T
0.4174956292398390	0.8677540625379156	0.8998498326253962	T	T	T
0.6669347444644864	0.8671061951843289	0.9002298489276579	T	T	T
0.9163432100242901	0.8660678157173627	0.8996776398891915	T	T	T
0.9936939560818612	0.9966655675365057	0.9965534557288952	T	T	T
0.2483176762031800	0.9983984603461554	0.9966086783656236	T	T	T
0.4999686515587862	0.0026705122309881	0.9968055241500967	T	T	T
0.7477263093365325	0.0006310439230328	0.9975185514936185	T	T	T
0.9940740256060847	0.1991994543285591	0.9962020391521246	T	T	T
0.2359144192949275	0.1909121941099017	0.0016918613944676	T	T	T
0.4962663768792865	0.2053647900387064	0.0006056682857063	T	T	T
0.7478743394816736	0.2013070394481448	0.9963259226811826	T	T	T
0.0034370608290224	0.4014309707933806	0.99637387811192052	T	T	T
0.2485238592805110	0.3968351831127831	0.0026900002338697	T	T	T
0.5276399633214079	0.4124840197789615	0.0018541028172789	T	T	T
0.7625251198098724	0.4046046599411111	0.9965082577543261	T	T	T
0.0066282060389169	0.6031175801604791	0.9972568600764843	T	T	T
0.25271857086638383	0.6020096439558889	0.9962401601681335	T	T	T
0.5041466058945751	0.6031355831088056	0.9972598450640957	T	T	T
0.7620420546134548	0.6080621242971166	0.9961758120868497	T	T	T
0.0037429313580289	0.8024130063706344	0.9972761301253065	T	T	T
0.2526010485488245	0.8015589805422602	0.9972057611306869	T	T	T
0.5011043729092222	0.8016633314220930	0.9971523708549052	T	T	T
0.7500714581104333	0.8012404278332532	0.9973357956211221	T	T	T
0.3310415867177300	0.3334806577733637	0.0774770285914339	T	T	T
0.4081298422813840	0.2710892714017727	0.0657965495985841	T	T	T
0.2978573608884281	0.3494621594969730	0.1360830876518393	T	T	T
0.1799174143496242	0.4910228980789588	0.1468511115533216	T	T	T
0.2474772816120705	0.3999440537608503	0.1382075748590270	T	T	T
0.1409762225589298	0.4998813562459805	0.1060039115234741	T	T	T
0.2587629588031517	0.5721078130714307	0.1576425464259289	T	T	T
0.4314096660002986	0.2339044935672174	0.1081469230152006	T	T	T
0.4097447646507748	0.4603854153591392	0.0437888320305051	T	T	T

FS: structure64

HOCCH_{ad} + H_{ad} = HOCCH_{2,ad}

IS: structure57 + 1/2H₂

TS: structure74

```

structure74
1.0000000000000000
10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
-6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015

```

```

Cu    C    O    H
60    2    2    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
0.1661662103825327	0.0678996507905480	0.9008246531490789	T	T	T
0.41758481444412060	0.0697191592463271	0.9005413262998011	T	T	T
0.6666618817795339	0.0672934762382595	0.9000721782163636	T	T	T
0.9159306692072975	0.0670190693775215	0.9002400859650432	T	T	T
0.1675005543105823	0.2662557299402217	0.9010957753183142	T	T	T
0.4157663834732602	0.2689307597780942	0.9004892900385705	T	T	T
0.6649633369593939	0.2672526692466059	0.9006331498625164	T	T	T
0.9169666216138359	0.2673451409196598	0.8997470038907048	T	T	T
0.1706022319317804	0.4650276758542490	0.9011590148210397	T	T	T
0.4188180327153789	0.4667557335314806	0.9005037086467413	T	T	T
0.6672352376329220	0.4676271806174787	0.9007122882654254	T	T	T
0.9179707296430339	0.4668918624268785	0.8999851268179448	T	T	T
0.1672356118116410	0.6666792094950544	0.8992596645235815	T	T	T
0.4173918404836546	0.6671132102297556	0.8992872340050765	T	T	T
0.6677631844629568	0.6677757205378765	0.8995640269155832	T	T	T

0.9190529171777819	0.6673565255932110	0.8993151441198964	T	T	T
0.1671111610984835	0.8674190950242087	0.8994753840894077	T	T	T
0.4165711211744640	0.8672516431892047	0.8996164450564428	T	T	T
0.6666404921580047	0.8674062392442656	0.9002490247759395	T	T	T
0.9160660091862338	0.8659132580559935	0.8996966544953556	T	T	T
0.9931153113689439	0.9964512249912941	0.9968944942762415	T	T	T
0.2469489190301109	0.9961856508486884	0.9963092205465588	T	T	T
0.4991051350525765	0.0008151638053981	0.9966947242478570	T	T	T
0.7473542875021880	0.0005194773919104	0.9976194204236845	T	T	T
0.9955346495957915	0.1991391181696545	0.9964953995648409	T	T	T
0.2369949473620563	0.1887787076107897	0.0016303879084671	T	T	T
0.4926764625693680	0.1998911378127347	0.9998414506082456	T	T	T
0.7483119430140419	0.2010260199980388	0.9964018965316697	T	T	T
0.0022627283634409	0.4006109071239146	0.9964087397899786	T	T	T
0.2577944603633906	0.3988516144263153	0.0011787074978525	T	T	T
0.5169040655290242	0.4185761874270765	0.0019562123764712	T	T	T
0.7543125911527354	0.4025019008082139	0.9982789479410569	T	T	T
0.0034499143384626	0.6011603780805398	0.9972196302131057	T	T	T
0.2515959377532190	0.6010493205420693	0.9955729745617726	T	T	T
0.5042645396583609	0.6074652276329586	0.9958728235069999	T	T	T
0.7598723615050873	0.6083241576306879	0.9962865522633054	T	T	T
0.0022978441016784	0.8015162145476885	0.9971810167134744	T	T	T
0.2503346849310762	0.7999330408492414	0.9970835168665294	T	T	T
0.4999386069823354	0.8020802221886975	0.9972101803969564	T	T	T
0.7500184786290356	0.8021219765590623	0.9975632773953702	T	T	T
0.3367344913601085	0.3395247063440893	0.0720554594986053	T	T	T
0.4022895138257417	0.2651765714038588	0.0689198439720121	T	T	T
0.3082540130839583	0.3639607895184927	0.1302833227508251	T	T	T
0.2281788042742265	0.5325370318405278	0.1421722476613858	T	T	T
0.2708497691347878	0.4229413944052863	0.1306288346574272	T	T	T
0.1554204339546844	0.5269546932905900	0.1104462677153329	T	T	T
0.4234232127500088	0.2349747599545072	0.1140888146327585	T	T	T
0.5703274571203401	0.3312199879473557	0.045200364594851	T	T	T
0.3167696893458318	0.6108765825643058	0.1341537173136509	T	T	T

FS: structure75

```

structure75
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
  Cu      C      O      H
  60      2      2      5

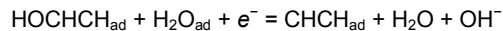
```

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.1692883697768915	0.0694358883139851	0.9011772021807972	T	T	T
0.4170237772131969	0.0671231727664583	0.8993713819181540	T	T	T
0.6684156052611498	0.0675356442036064	0.8998479663154614	T	T	T
0.9178040201002604	0.0672696479549320	0.8999261479164875	T	T	T
0.1691975032089046	0.2664385388583794	0.9015288213556421	T	T	T
0.4171608935847612	0.2688327793804137	0.9019183842621290	T	T	T
0.6663433609187749	0.2678398284545610	0.9001067840725484	T	T	T
0.9171302670096172	0.2673946195199473	0.8996246458921077	T	T	T
0.1670975971286105	0.4669653492571491	0.8996147571600608	T	T	T
0.4180951882043427	0.4671839757412620	0.9002783785384949	T	T	T
0.6634870617350959	0.4664304611975336	0.9020651460495710	T	T	T
0.9164827839693664	0.4673230906001009	0.8996964526830149	T	T	T
0.1666155745646011	0.6672239234841130	0.8994347841554147	T	T	T
0.4168978149031570	0.6675615567595665	0.8990723392349759	T	T	T
0.6681699154655220	0.6676309037644755	0.8995636804753069	T	T	T
0.9172972708940854	0.6670915607320087	0.8997927590310663	T	T	T
0.1670628593257953	0.8669674989718138	0.8996907486037115	T	T	T
0.4173103660724726	0.8669583178279689	0.8995264037196696	T	T	T
0.6676209097959733	0.8672436980550494	0.8999950966236551	T	T	T
0.9177014660440762	0.8671259928582085	0.8998648828863970	T	T	T
0.9996468975957071	0.0000012680149973	0.9968520781861303	T	T	T
0.2493954321123712	0.9971919511521388	0.9962245467689346	T	T	T
0.5019162433057428	0.9992700898272349	0.9964932826618942	T	T	T
0.7512995136072220	0.0010425250809778	0.9971327925824045	T	T	T
0.0002686492590557	0.2007798818672170	0.9963285970213860	T	T	T
0.2505534799693615	0.1963604322049186	0.0039949317889359	T	T	T
0.5032458178552465	0.1974454254207769	0.9950520825574616	T	T	T
0.7523821665253543	0.2013366259736269	0.9967577190597050	T	T	T
0.0008595077532778	0.4014338869103203	0.9966416494183413	T	T	T
0.2491658520340280	0.4027628638730392	0.9956817207393839	T	T	T

0.5054050980345887	0.4109570737077329	0.0050818846656893	T	T	T
0.7523795947966779	0.4019705331610240	0.9968401734068593	T	T	T
0.0016378865232282	0.6017153498598135	0.9968975286330326	T	T	T
0.2509690142072358	0.6023225924965953	0.9961459175788826	T	T	T
0.5034003382465457	0.6068114465673022	0.9949679569622936	T	T	T
0.7542924156409555	0.6048698080370895	0.9970438090924312	T	T	T
0.0015240925609825	0.8014165414545006	0.9971594070053965	T	T	T
0.2511676093813706	0.8006072453142915	0.9970059493083705	T	T	T
0.5011349053187251	0.8018152891740065	0.9971995853505093	T	T	T
0.7519317094523122	0.8025336894979662	0.9974588026081808	T	T	T
0.3998406840730743	0.3364622610231165	0.0841276142583174	T	T	T
0.3654838415724762	0.2157162230710966	0.0915742934215776	T	T	T
0.3342107773664893	0.3723986850138704	0.1262217422800553	T	T	T
0.3851583481074591	0.5967555259268565	0.1392295254202469	T	T	T
0.3611553160570505	0.4590309164777395	0.1226745775574213	T	T	T
0.2874510576616642	0.5894589233136612	0.1472342546896423	T	T	T
0.2913487026107587	0.1617548023785974	0.1301706666078718	T	T	T
0.4606892045655773	0.1990803033018404	0.0852242840695595	T	T	T
0.4240742140250467	0.6501392871243519	0.1023111689741082	T	T	T



IS: structure76

structure76

1.0000000000000000					
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000			
-6.4258328740327499	11.1298690187710640	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			

Cu	C	O	H		
60	2	6	13		

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
0.1684508921805491	0.0686631783437822	0.9008473115951171	T	T	T
0.4178958779234457	0.0685648207910362	0.9005047574169827	T	T	T
0.6681123099770817	0.0674779668946156	0.8997943659270939	T	T	T
0.9173535130138701	0.0673720783981723	0.8998619276210870	T	T	T
0.1687588966167473	0.2662978559354161	0.9010505976230510	T	T	T
0.4167823520040940	0.2674500564238919	0.9002413164887784	T	T	T
0.6658586022878685	0.2674010480193159	0.9005503811155712	T	T	T
0.9173178346112015	0.2675977467905507	0.8997429690989258	T	T	T
0.1669766166770131	0.4678709893761073	0.8990551413090564	T	T	T
0.4180736195486452	0.4666240751131916	0.9000911401866730	T	T	T
0.6647559088574911	0.4663214725091768	0.9004677750951671	T	T	T
0.9175446192451759	0.4678903835319356	0.8994210713746981	T	T	T
0.1672140866450352	0.6678462399472692	0.8997327496330243	T	T	T
0.4172499327170517	0.6678422201517661	0.8994933048181972	T	T	T
0.6681905532157473	0.6686698655014466	0.9008371361945769	T	T	T
0.9179433805116998	0.6675006170294616	0.8993980145069717	T	T	T
0.1677661559419190	0.8676255858687949	0.8994102412299569	T	T	T
0.4175940394083441	0.8677045315944847	0.8996944369041888	T	T	T
0.6684508443769857	0.8664605330679012	0.9018626338269989	T	T	T
0.9155707879853880	0.8661455481079676	0.9010235811817866	T	T	T
0.0016555930280819	0.0018608713842433	0.9961014435927734	T	T	T
0.2494982765036704	0.9972739949097197	0.9968428417893602	T	T	T
0.5014653408710639	0.0014666060720252	0.9968821538017857	T	T	T
0.7512899785209574	0.0024373589612346	0.9971226295966945	T	T	T
0.0010555785070861	0.2015668705272206	0.9964924333863431	T	T	T
0.2515037212012723	0.1979851352998684	0.0032972276018047	T	T	T
0.5020298747547061	0.2017390957106716	0.9984489315772623	T	T	T
0.7516500612846602	0.2016349892795263	0.9968672997361138	T	T	T
0.0010805832701132	0.4017973172123444	0.9972012328033282	T	T	T
0.2475910970649573	0.4040708514020459	0.9945267799543770	T	T	T
0.5040411384737447	0.4039696986469234	0.0003114196124653	T	T	T
0.7560687830587917	0.4032100508486068	0.9963263014114133	T	T	T
0.0022665348914834	0.6020094125974708	0.9975454515834589	T	T	T
0.2503109785386198	0.6021710973621471	0.9968280136872889	T	T	T
0.4998333007543128	0.6021279071417048	0.9954501765272420	T	T	T
0.7531022351889780	0.6014407950096452	0.9954001739404877	T	T	T
0.0031366380106005	0.8009098371491985	0.9964095444405748	T	T	T
0.2517615543658792	0.8009265688719396	0.9975214934409093	T	T	T
0.5001528923143781	0.8017533844043486	0.9970972579306659	T	T	T
0.7520610347416460	0.8013780633617118	0.0032447569247170	T	T	T
0.3848280754681929	0.3472803965039747	0.1122283139086717	T	T	T
0.4092537701659774	0.2747348222308132	0.0717825261294896	T	T	T

0.4535935352242858	0.3856412196213875	0.1680411571396301	T	T	T
0.3178505064009354	0.4820712186786323	0.2200599743974434	T	T	T
0.7510731893648804	0.5836119250193417	0.1480062379570930	T	T	T
0.7678997460220404	0.7901004893362311	0.1134077665441251	T	T	T
0.5613474388072481	0.8574538466537442	0.1531965511945435	T	T	T
0.2937571568363651	0.6560199933390557	0.1689312221242875	T	T	T
0.4036494337332582	0.4275464966503120	0.1918434939680084	T	T	T
0.3180548661692330	0.4916529116896039	0.2652564311776910	T	T	T
0.3104873275859856	0.5510310220539277	0.1998938609148068	T	T	T
0.4795627597024179	0.2425370856531283	0.0948989737263737	T	T	T
0.6526649292479135	0.5114922200142554	0.1565613770099598	T	T	T
0.7989613612223473	0.5590607170151586	0.1160507016962501	T	T	T
0.7568465962558458	0.7102093920942167	0.1265663443898871	T	T	T
0.8713551160988310	0.8503762905584447	0.1234508468206130	T	T	T
0.6364316656389317	0.8343284463456695	0.1407693002818393	T	T	T
0.5614921486892414	0.9078847468379330	0.1187268507391780	T	T	T
0.3915857058758648	0.7325655378075115	0.1621169072181378	T	T	T
0.2418397024655545	0.6373395415397903	0.1285295822199377	T	T	T
0.3025863061726040	0.3759724310466839	0.1016023503344121	T	T	T

TS: structure77

structure77

1.000000000000000

10.2813325984523996

-6.4258328740327499

0.000000000000000

Cu C O H

60 2 6 13

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
0.1670519895833654	0.0670049673182843	0.8991252106862083	T	T	T
0.4173704768527168	0.0689384843383796	0.9005786361086604	T	T	T
0.6668398040938592	0.0673713370173016	0.8993495691044437	T	T	T
0.9161465449514977	0.0668851573452632	0.8991707819561665	T	T	T
0.1685622316489772	0.2673079493874874	0.9012681455146524	T	T	T
0.4169775533141464	0.2680295985743667	0.8995908822924179	T	T	T
0.6653026712507417	0.2665946655761272	0.9003447542936697	T	T	T
0.9165833713547626	0.2670677966105155	0.8994480260166176	T	T	T
0.1689980333622408	0.4664405553549390	0.9009038173731361	T	T	T
0.4184114317048905	0.4670496841655381	0.9000086122789063	T	T	T
0.6656852666521937	0.4682161761748976	0.9025923027284323	T	T	T
0.9167392152019800	0.4667153541308979	0.8992686031251228	T	T	T
0.1673694868744036	0.6670360716142367	0.8991321788379371	T	T	T
0.4173453249395966	0.6676829673308112	0.8993183678115192	T	T	T
0.6699177758523134	0.6677549970894300	0.9030917981631047	T	T	T
0.9147141050665608	0.6652225338810029	0.9008796950742699	T	T	T
0.1673506677377989	0.8664483291944357	0.8986602486951606	T	T	T
0.4178075779967670	0.8679832232659659	0.8993143910700809	T	T	T
0.6679603108375332	0.8657352142383494	0.9015522053938667	T	T	T
0.9147216046285129	0.8648092787087893	0.9000911417395497	T	T	T
0.9985443737651334	0.9995723561118015	0.9942215833192725	T	T	T
0.2487895007767776	0.9953239247709702	0.9959939994712480	T	T	T
0.5009727340851954	0.0019622849887369	0.9965835497492560	T	T	T
0.7500192160548649	0.0037738617497585	0.9961064016870369	T	T	T
0.9987563812962342	0.1995543140400551	0.9955902398775768	T	T	T
0.2423877352574457	0.1878473754813288	0.9986323780402752	T	T	T
0.4998371799996620	0.2037654688408450	0.0006199614925222	T	T	T
0.7497307893863389	0.2003413824852561	0.9965241016670302	T	T	T
0.0022603649501005	0.4000755582386117	0.9962855673372133	T	T	T
0.2544613373078460	0.4022261933556349	0.0002086846618568	T	T	T
0.5030218325044099	0.4048613812204131	0.0001798087443774	T	T	T
0.7546138538723994	0.3993667334617428	0.9956529482362840	T	T	T
0.0049100341295585	0.6004021846235043	0.9960306521644655	T	T	T
0.2508885608813100	0.6020404891012554	0.9972019126845759	T	T	T
0.4988182595460052	0.6041229127505103	0.9948343369342693	T	T	T
0.7555839951907350	0.6010741943585357	0.0028281132173049	T	T	T
0.0051256058952900	0.8016218412821742	0.9949636514646991	T	T	T
0.2512412914040761	0.8001688587724376	0.9967748378066849	T	T	T
0.4987674387513824	0.8021574513371689	0.9969640354142282	T	T	T
0.7517107660563896	0.8056551682451581	0.0021684163951969	T	T	T
0.3591760871692008	0.3519697091356680	0.0769166083688962	T	T	T
0.3992629671135822	0.2645707247686441	0.0668402511073856	T	T	T
0.4763857348801188	0.4518968586794573	0.1430204055251166	T	T	T
0.3042920040043825	0.5337082874853053	0.1846902531019975	T	T	T
0.7390336758825667	0.6006012002248797	0.0980807707637026	T	T	T

0.7853049598266210	0.8099876855891649	0.1049922776122577	T	T	T
0.6246180074016117	0.9120660432974187	0.1550441033454882	T	T	T
0.3285859278996517	0.7438300008519555	0.1583976680169120	T	T	T
0.4213956188685655	0.4941700892297755	0.1588817542965352	T	T	T
0.2842395328525147	0.5219256598500935	0.2295038982927361	T	T	T
0.3144625751728332	0.6145584527189075	0.1744458000351701	T	T	T
0.4392455937702795	0.2323424251960889	0.1061188684043115	T	T	T
0.5805303249653209	0.5133184158294063	0.1257365049453487	T	T	T
0.8122821660989901	0.5833913087275137	0.1173050609719203	T	T	T
0.7711777055285047	0.7218839044704604	0.1081785202517291	T	T	T
0.8920188835275251	0.8664200680032365	0.1116909793939129	T	T	T
0.6804504738896607	0.8725177416765955	0.1396083423588911	T	T	T
0.6431875259043315	0.9730504217375513	0.1233934223989435	T	T	T
0.4369618954412900	0.8086468129478114	0.1576481587143193	T	T	T
0.2918386957815632	0.7429523546875195	0.1158522936408798	T	T	T
0.2591333480307094	0.3414750261612107	0.1011483725844335	T	T	T

FS: structure78

```

structure78
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
  Cu   C   O   H
  60   2   6   13

```

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
0.1678575237979023	0.0691141434574098	0.8994956000277988	T	T	T
0.4192395174161305	0.0683492903691681	0.90174698202070627	T	T	T
0.6658593721507808	0.0648142405098237	0.9044261252507065	T	T	T
0.9135623027928984	0.0661577119350953	0.9002354369272756	T	T	T
0.1684704163858431	0.2664544792665706	0.8996662172047942	T	T	T
0.4163392494572212	0.2681236542325580	0.8996720310196521	T	T	T
0.665159932867333	0.2664960179989299	0.9000735292976857	T	T	T
0.9161523766860564	0.2670357439796029	0.8988151587304665	T	T	T
0.1688820362996062	0.4648188957192915	0.9003840550185438	T	T	T
0.4193926214068424	0.4688899106388896	0.9020632914436926	T	T	T
0.6657186083913242	0.4667550992492401	0.8997665020554735	T	T	T
0.9180340248995310	0.4673162221390136	0.8990011506857669	T	T	T
0.1677161015290254	0.6667131512439350	0.8984692185796256	T	T	T
0.4187365955761347	0.6665471356255747	0.9004799783683943	T	T	T
0.6649949856303408	0.6672807900600414	0.9031202266003897	T	T	T
0.9185125911641477	0.6670961768213343	0.8985554955773188	T	T	T
0.1680328374187831	0.8677307629875842	0.8982026638727491	T	T	T
0.4180880536628367	0.8686457207895565	0.9003177558160562	T	T	T
0.6706169748141916	0.8686385758581637	0.9036498778903090	T	T	T
0.9142169359960157	0.8640203646207373	0.8997252469170588	T	T	T
0.9996133112945700	0.9973004534676275	0.9931088771657857	T	T	T
0.2456610073143065	0.9969316424147644	0.9947580696966377	T	T	T
0.4964750413253275	0.0000648212872707	0.0029149778764882	T	T	T
0.7533999696249941	0.0042335242386506	0.0049739162543806	T	T	T
0.9986125551439028	0.2026896676206928	0.9937045611302791	T	T	T
0.2371819495085014	0.1898831392365884	0.0016483792737966	T	T	T
0.4982997639012853	0.2049206681973537	0.9997849911071562	T	T	T
0.7500892894810738	0.2041700631225024	0.9957857028399743	T	T	T
0.0014576899596972	0.401123222234934	0.9962369067471183	T	T	T
0.2503436525614479	0.3963140975750030	-0.0006316457824021	T	T	T
0.5172093753993663	0.4121361599797786	-0.0004911924974631	T	T	T
0.7568090845495071	0.4030587922671591	0.9959785753789361	T	T	T
0.0030943824584004	0.6006458151387700	-0.0025419518297755	T	T	T
0.2465364758581196	0.5990898353088275	0.9945583151103089	T	T	T
0.4980999791298439	0.6032750237003833	0.0033788350060788	T	T	T
0.7604431038689127	0.6033623121121164	0.9950331074082679	T	T	T
0.0052280627442761	0.7995123956659465	0.9956786681466567	T	T	T
0.2472868171284526	0.7978582557617789	0.9949487935251877	T	T	T
0.4985864418641742	0.8015185366805434	0.9947119519072347	T	T	T
0.7551683224947318	0.7994260923220760	0.0011686836568611	T	T	T
0.3410763926400165	0.3362173279788913	0.0643581100672231	T	T	T
0.4162867777094585	0.2723015574978446	0.0652535145224460	T	T	T
0.4911780020770938	0.6200940336305607	0.1023435948447602	T	T	T
0.3191383790600064	0.7168630713723337	0.1397806373111471	T	T	T
0.7715677361950496	0.8084545198587285	0.1039131580997088	T	T	T
0.8147744327931825	0.0153887688324252	0.0999279817070701	T	T	T
0.687323206918140	0.1084095409170226	0.1682134667524872	T	T	T
0.4456375394197595	0.9664663483497725	0.1083494260025011	T	T	T

0.4248954617214143	0.6523158264268329	0.1164689755635861	T	T	T
0.2300742989988087	0.6827475182218904	0.1127257524687376	T	T	T
0.3690049729558897	0.8044986110011831	0.1315912236138898	T	T	T
0.4509254173792305	0.2514095365435225	0.1101355696896220	T	T	T
0.5951808687629719	0.6852431241471191	0.1123096194392367	T	T	T
0.8596901398768274	0.8045928765521341	0.1173175264990279	T	T	T
0.7952864123158787	0.9012159148846451	0.1078715175756456	T	T	T
0.9230858477876859	0.0714511308544448	0.1008464701243378	T	T	T
0.7460146404324979	0.0760327441438930	0.1442767187430138	T	T	T
0.7334122925056236	0.1927552157507269	0.1564465483374461	T	T	T
0.5374183958950028	0.0282882402451041	0.1342398751118477	T	T	T
0.3644057046986752	0.9836638321303561	0.1153500393899756	T	T	T
0.3164746309803504	0.3688837215417218	0.1079287691323108	T	T	T

HOCHCH_{ad} + H_{ad} = HOCHCH_{2,ad}

IS: structure64 + 1/2H₂

TS: structure79

```

structure79
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499     11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

Cu C O H

60 2 2 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
0.3333333333333285	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
0.1675635027441805	0.0686835040089607	0.9008012022482396	T	T	T
0.4181897500773553	0.0696827222199926	0.9007518196977080	T	T	T
0.6674757931489650	0.0677430285697575	0.8997971933458914	T	T	T
0.9171731801971561	0.0679216338084605	0.9002011044830723	T	T	T
0.1690939322783282	0.2663611126375162	0.9014240805087528	T	T	T
0.4162642219857946	0.2675689326083411	0.9000858271715853	T	T	T
0.6647254502345238	0.2669689285650061	0.9012221745202299	T	T	T
0.9179863373321510	0.2679072467075124	0.8996122744697514	T	T	T
0.1663675486066317	0.4675643449774265	0.8992884111198216	T	T	T
0.4167450310893074	0.4678681893808883	0.898886582924056	T	T	T
0.6693602612582479	0.4679204243371087	0.8988470662081176	T	T	T
0.9160728691957055	0.4666723439455994	0.9006840844649034	T	T	T
0.1663491331254603	0.6671791185692354	0.8998091408269072	T	T	T
0.4164688033354366	0.6676120846758586	0.8997872968260867	T	T	T
0.6668424690672057	0.6676670867267878	0.8999138886455288	T	T	T
0.9171659960600749	0.6675073701719620	0.8998246061263470	T	T	T
0.1667641230445194	0.8676045507407892	0.8995984251744703	T	T	T
0.4162355102009697	0.8672743534874086	0.8994827844096533	T	T	T
0.6666472143857263	0.8677536714486459	0.9001684028389595	T	T	T
0.9165376234971518	0.8672460338806021	0.8998730846946696	T	T	T
0.9967116842228083	0.9993914204098153	0.9969029550129870	T	T	T
0.2470488625062815	0.9971309460645560	0.9957522449151346	T	T	T
0.5006084821074008	0.9995606404138655	0.9958103464982898	T	T	T
0.7495615078415858	0.0009491953205724	0.9972278486099294	T	T	T
0.0000294115708719	0.2013921425284051	0.9969285869576726	T	T	T
0.2478100028782871	0.1984799244179116	0.0024169667039743	T	T	T
0.4994704920739372	0.2006646453731044	0.0007539642468210	T	T	T
0.7523478758062844	0.2011223547624660	0.9961910597692228	T	T	T
0.0006764715956028	0.4014733499272503	0.9970926782948167	T	T	T
0.2511191035174140	0.4034721563122267	0.9953656608078640	T	T	T
0.5077541164150388	0.4106979151812391	0.9929089162900999	T	T	T
0.7482472220799569	0.4009038760867711	0.9998073624755045	T	T	T
0.9998603247414934	0.6010455531028328	0.9972290359859715	T	T	T
0.2496579028610778	0.6013354239194335	0.9972175404998371	T	T	T
0.5003758607604565	0.6033936552789719	0.9969842699548865	T	T	T
0.7530747406051517	0.6040924234761742	0.9969334169059665	T	T	T
0.0000774509658427	0.8014119088243997	0.9972466921314026	T	T	T
0.2497319568056748	0.8005693488730827	0.9968917664507038	T	T	T
0.4992992889498744	0.8011291826521808	0.9972780720014826	T	T	T
0.7493960190607172	0.8013891286089936	0.9972882532963799	T	T	T
0.3469609344133513	0.2717912979388151	0.1095898464816119	T	T	T
0.3833891991432593	0.1946731542534579	0.0791467078219263	T	T	T
0.2587029249682257	0.2410437821894012	0.1602133569808918	T	T	T
0.2014505039914647	0.4236478840335559	0.1589530296925309	T	T	T
0.2364882412464466	0.3077793418659673	0.1682054963877100	T	T	T
0.1696129264464583	0.4272147434812592	0.1157437904185140	T	T	T

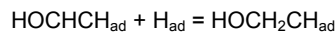
0.3530743985839326	0.1113613059219441	0.1048343388416347	T	T	T
0.5605370860949862	0.3018316491336865	0.0539361179134848	T	T	T
0.2782584300273231	0.5059146766631556	0.1686685395121656	T	T	T
0.3955223267633360	0.3662339347889447	0.0947121556035899	T	T	T

FS: structure80

```

structure80
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      2      6
Selective dynamics
Direct
0.0833333333333357 0.1333333333333329 0.8029049805823902 F F F
0.3333333333333286 0.1333333333333329 0.8029049805823902 F F F
0.5833333333333357 0.1333333333333329 0.8029049805823902 F F F
0.8333333333333286 0.1333333333333329 0.8029049805823902 F F F
0.0833333333333357 0.3333333333333357 0.8029049805823902 F F F
0.3333333333333286 0.3333333333333357 0.8029049805823902 F F F
0.5833333333333357 0.3333333333333357 0.8029049805823902 F F F
0.8333333333333286 0.3333333333333357 0.8029049805823902 F F F
0.0833333333333357 0.5333333333333314 0.8029049805823902 F F F
0.3333333333333286 0.5333333333333314 0.8029049805823902 F F F
0.5833333333333357 0.5333333333333314 0.8029049805823902 F F F
0.8333333333333286 0.5333333333333314 0.8029049805823902 F F F
0.0833333333333357 0.7333333333333343 0.8029049805823902 F F F
0.3333333333333286 0.7333333333333343 0.8029049805823902 F F F
0.5833333333333357 0.7333333333333343 0.8029049805823902 F F F
0.8333333333333286 0.7333333333333343 0.8029049805823902 F F F
0.0833333333333357 0.9333333333333300 0.8029049805823902 F F F
0.3333333333333286 0.9333333333333300 0.8029049805823902 F F F
0.5833333333333357 0.9333333333333300 0.8029049805823902 F F F
0.8333333333333286 0.9333333333333300 0.8029049805823902 F F F
0.168888910394470 0.0698459479623640 0.9017551810846207 T T T
0.4177067362108049 0.0679710376671354 0.8997862728524980 T T T
0.6678757289814492 0.0680007531597738 0.9000078435276931 T T T
0.9177831621361258 0.0679661200854363 0.9000043980678275 T T T
0.1686249828783626 0.2666524817635808 0.9024548217883362 T T T
0.4145774686843930 0.2668880054001662 0.9017803636391615 T T T
0.6675699487439614 0.2682008298708534 0.8996400164714217 T T T
0.9175839856648808 0.2679308523037023 0.8998851282681062 T T T
0.1664971238232384 0.4675589268369399 0.8994658204182441 T T T
0.4169666289252648 0.4677986143549747 0.8995012165278401 T T T
0.6668093400455974 0.4676415307677403 0.8997328940962331 T T T
0.9168351175684823 0.4679121304471129 0.8997936935456585 T T T
0.1668971752502461 0.6677707646405588 0.8997301132362399 T T T
0.4170765369214612 0.6678707854731866 0.8995420628940172 T T T
0.6672540559134797 0.6678671009956721 0.8998304242911037 T T T
0.9168820812627868 0.6677189937998973 0.8998699635731012 T T T
0.1671692360849543 0.8677080833115766 0.8997114571442124 T T T
0.4175024654346826 0.8677928161961193 0.8998688720769604 T T T
0.6674174588952708 0.8677844332206889 0.9000317636565823 T T T
0.9178225625530949 0.8680804629907285 0.8998119468598709 T T T
0.9994516553613065 0.0011297920311619 0.9965841704853501 T T T
0.2518490637496639 0.0001347392966126 0.9960282401031868 T T T
0.5017405535382299 0.0016747500173625 0.9970299321391335 T T T
0.7508510062791923 0.0018806111829573 0.997175188779677 T T T
0.9991348090035381 0.2019974697962325 0.9969597193626472 T T T
0.2520903944147037 0.2009790462912734 0.0082145948144073 T T T
0.5043255578994217 0.2023314942654967 0.9960314578235742 T T T
0.7514217739609598 0.2025034507073618 0.9972556240444662 T T T
0.0007796219844378 0.4028508279998588 0.9967129214911894 T T T
0.2513837924114118 0.4045453144764848 0.9961700111869503 T T T
0.5021726056196841 0.4043504607757814 0.9962835697954030 T T T
0.7507949853540554 0.4026980876209402 0.9970251250461102 T T T
0.0008838975913235 0.6024259413716970 0.9969743371714370 T T T
0.2509863400823487 0.6027568712977173 0.9967959712188040 T T T
0.5007837473813451 0.6029415124567027 0.9967997347650693 T T T
0.7509833818037732 0.6026659628841736 0.9970388736592248 T T T
0.0010517776381860 0.8021558824247987 0.9969436458402542 T T T
0.2512017928739917 0.8017485707852907 0.9971620806121392 T T T
0.5006853037964002 0.8018074739368968 0.9973354907256781 T T T
0.7510427763594753 0.8021107151765072 0.9971464876306924 T T T
0.2946284491465915 0.2779210011053495 0.1285761655387669 T T T
0.2504501679982228 0.1610425260569018 0.1130251061224851 T T T
0.1982439234738082 0.3123092818847717 0.1467190602355901 T T T
0.3427605921729408 0.5498193139720337 0.1504057831305125 T T T
0.2504548510908086 0.4029551743782259 0.1505691461423001 T T T
0.2879315173274882 0.5871888853171731 0.1674511081680114 T T T
0.1353422345941650 0.0904680694254119 0.1224796548033753 T T T
0.3368299228918282 0.1354409375546719 0.1116208763801122 T T T
0.3617948445924361 0.5756467621180995 0.1059512326410176 T T T
0.4138963210118556 0.3475842334344359 0.1273511020854762 T T T

```



IS: structure64 + 1/2H₂

TS: structure81

```

structure81
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000

```

0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	O	H		
60	2	2	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
0.3333333333333285	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
0.1668963948973072	0.0672777182963925	0.9003640418004059	T	T	T
0.4180489586322283	0.0692272140948741	0.9008798438089863	T	T	T
0.6677390663954419	0.0670336561689946	0.9000172630267624	T	T	T
0.9170547159910399	0.0671990890391990	0.9001275175953016	T	T	T
0.1684697072865305	0.2664130932713962	0.9011296665239524	T	T	T
0.4165853626197329	0.2676720494644330	0.9003524155026191	T	T	T
0.6661244717865773	0.2668745272160268	0.9006929370916963	T	T	T
0.9171608756947578	0.2672878587492482	0.8997293744908801	T	T	T
0.1678806217013484	0.4678226299718343	0.8990904006484046	T	T	T
0.4185617451247740	0.4660089149134877	0.9000263804384416	T	T	T
0.6648321898696294	0.4662647495114684	0.9011510736315270	T	T	T
0.9165402366458091	0.4668866973771754	0.8995882674359661	T	T	T
0.1671784420985583	0.6672574325558314	0.8995358633537539	T	T	T
0.4173300174750585	0.6665185740051708	0.8998194010144118	T	T	T
0.6663540734529163	0.6667838712671678	0.9001290631514913	T	T	T
0.9171841810002933	0.6668919459851501	0.8993855159119029	T	T	T
0.1669857625007255	0.8668081850393315	0.8995449344094875	T	T	T
0.4171961167181678	0.8673494104352082	0.8997244963579184	T	T	T
0.6667779659933615	0.8669079324824356	0.9002622103262172	T	T	T
0.9162462126459539	0.8661219126476226	0.8998888812921934	T	T	T
0.9972131205133492	0.9980555954753979	0.9967423384480176	T	T	T
0.2478131587071286	0.9952897048306073	0.9964353909894693	T	T	T
0.5010049248673283	0.0009603260736788	0.9965060721902619	T	T	T
0.7500492216980856	0.0004688135475396	0.9974300121771918	T	T	T
0.0009030130159866	0.2004046574549704	0.9967393079582370	T	T	T
0.2461128682475396	0.1920889264857355	0.0017022322603321	T	T	T
0.5028172374582776	0.2031925002881883	0.0001010090130473	T	T	T
0.7518666776561369	0.2005764827286069	0.9965864243835840	T	T	T
0.0013269907258179	0.4010744672842384	0.9967432599114051	T	T	T
0.2480928452820815	0.4041552441459416	0.9949093580719269	T	T	T
0.5073771076904746	0.4028205501012450	0.0023356993395714	T	T	T
0.7557364493509667	0.4024575722676765	0.9969146620789505	T	T	T
0.0019485387807076	0.6017097966436028	0.9968960775781213	T	T	T
0.2501613209914479	0.60222619197546227	0.9969990454408393	T	T	T
0.5001542170682105	0.6005988274555105	0.9975439542566824	T	T	T
0.7547708711275134	0.6033862690801359	0.9962748054713054	T	T	T
1.0000081922145760	0.8003020379426755	0.9969698225949722	T	T	T
0.2509703683595224	0.8000798091579899	0.9970841069278319	T	T	T
0.5001384003271714	0.8001655537766046	0.9973148400611979	T	T	T
0.7492247369699607	0.8003711183556964	0.9975034555545970	T	T	T
0.3958690311907038	0.3555688042471103	0.1029642473520913	T	T	T
0.4044877456811559	0.2614434592407220	0.0681152147979745	T	T	T
0.4896750680166752	0.4078410191476142	0.1529653751776986	T	T	T
0.3739672339899046	0.5564591213130659	0.1781919021923477	T	T	T
0.4577243834889037	0.4611992523887801	0.1731684033499995	T	T	T
0.3692771241584740	0.5903031794838808	0.1376458245110116	T	T	T
0.2802081222378291	0.5359639396493558	0.1993535935756454	T	T	T
0.4546017671208611	0.2199221186288860	0.0980115213825473	T	T	T
0.2818390103092103	0.3408060198098303	0.1104335581368932	T	T	T
0.4173038811471718	0.4463401649930966	0.0568528155702958	T	T	T

FS: structure82

structure82

1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710640	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu	C	O	H
60	2	2	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

0.333333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1667839867331173	0.0684376929560922	0.9009174672977934	T	T	T
0.4175331383575152	0.0691478418852170	0.9012018254683359	T	T	T
0.6676254893512643	0.0673751038856916	0.8999369707262941	T	T	T
0.9167706083770497	0.0670599161488479	0.8999528805351188	T	T	T
0.1671165202517854	0.2668030964864476	0.9003318673145809	T	T	T
0.4155515583922858	0.2665763920683401	0.8997242657011107	T	T	T
0.6649700948637095	0.2671698834777423	0.9006888731530548	T	T	T
0.9158842826832196	0.2675192650666308	0.8993047524412103	T	T	T
0.1668229778229296	0.4676119177303188	0.8993880892089656	T	T	T
0.4177979023349936	0.4660701683492362	0.90083391212190062	T	T	T
0.6652571348994831	0.4668520539405036	0.9001260948061992	T	T	T
0.9154706289009776	0.4672134896245055	0.8998985754734434	T	T	T
0.1665640148812687	0.6674969168198187	0.8997525152827497	T	T	T
0.4163846019396509	0.6670978897560780	0.8998519615853903	T	T	T
0.6668928369070003	0.6675755856571867	0.8998982983498376	T	T	T
0.9166119038783384	0.6672594444929558	0.8998349084515147	T	T	T
0.1665900653957156	0.8674142427238590	0.8998722057324904	T	T	T
0.4167518146794202	0.8677038022513643	0.8998956853883519	T	T	T
0.6663120389355922	0.8668423731927997	0.9003009752963816	T	T	T
0.9166136004454498	0.8671129590507791	0.9001399158192522	T	T	T
-0.0016258882708378	0.0003609582616460	0.9971070775691828	T	T	T
0.2467373394573867	-0.0020361140228436	0.9965204571645470	T	T	T
0.4998883282324063	0.0009154202087074	0.9967168333147347	T	T	T
0.7490452034523023	0.0003956146173120	0.9973090824990752	T	T	T
-0.0020039462866384	0.2009171551369135	0.9955750573863911	T	T	T
0.2456284603312227	0.2011032455594641	0.0030499220553389	T	T	T
0.5032445172162453	0.2030820823062021	0.0001907253150674	T	T	T
0.7504641532065217	0.2008709486130529	0.9966960801792591	T	T	T
-0.0006645813763549	0.4012439140623914	0.9968483924522583	T	T	T
0.2458004636007363	0.4027818679278099	0.9959639601536832	T	T	T
0.5030363657678787	0.3999442585785203	-0.0000632512220467	T	T	T
0.7533895489104748	0.4028514972649934	0.9975929306114150	T	T	T
0.0004487451599890	0.6019324552955669	0.9970269919620907	T	T	T
0.2495840596400320	0.6018091789497667	0.9971231289456435	T	T	T
0.4999255384747156	0.6011971485428331	0.9964359166281174	T	T	T
0.7500039679681002	0.6018427373225942	0.9964788296945805	T	T	T
-0.0012373758281051	0.8005836495401307	0.9972617956545655	T	T	T
0.2499190037663105	0.8008762247263772	0.9971766740018687	T	T	T
0.4992777997516470	0.8008329599639135	0.9974041289098987	T	T	T
0.7492722510292641	0.8010748892421198	0.9976083459677988	T	T	T
0.4001314754884853	0.3342441226675928	0.1266905339703363	T	T	T
0.4120617607198122	0.2722294979947629	0.0669603492730069	T	T	T
0.2902136400759606	0.2508675981227521	0.1686807329232276	T	T	T
0.0316806611335290	0.2712754857722849	0.1520235379279084	T	T	T
0.1945145556215573	0.2492184809569023	0.1603527736965515	T	T	T
0.0063926627877789	0.2812954373231072	0.108751782378822	T	T	T
0.0348575306275480	0.3376041600243068	0.1754314192939028	T	T	T
0.4345826613952285	0.2007128332719608	0.0858543777010983	T	T	T
0.3779346589442739	0.4078318392778346	0.1148805019520681	T	T	T
0.5094446004107200	0.3747355693814923	0.1512362980501191	T	T	T

CCH_{ad} + H_{ad} = CCH_{2,ad}

IS: structure83 + 1/2H₂

structure83					
1.000000000000000					
10.2813325984523996	0.000000000000000	0.000000000000000			
-6.4258328740327499	11.1298690187710640	0.000000000000000			
0.000000000000000	0.000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	H			
60	2	1			
Selective dynamics					
Direct					
0.083333333333357	0.133333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.133333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.133333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.133333333333329	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.333333333333357	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F

0.1665768184524279	0.0679040623377715	0.9003431354823868	T	T	T
0.4172231753977957	0.0694476330736802	0.9008354673660630	T	T	T
0.6674795330340677	0.0682633551540355	0.9001445032510240	T	T	T
0.9167072653061190	0.0676043838590884	0.8999239317241422	T	T	T
0.1676025147036833	0.2677678394212312	0.9010414214740683	T	T	T
0.4165235617443631	0.2679329581614962	0.9000193455432082	T	T	T
0.6655533114700065	0.2680880213577570	0.9009495568985607	T	T	T
0.9163600718216106	0.2680650992986798	0.8999332031108711	T	T	T
0.1695224127448982	0.4662542199133444	0.9018118533339888	T	T	T
0.4167836051799333	0.4667321697994214	0.9010776376079210	T	T	T
0.6659784414834248	0.4674864951547371	0.9003632971441565	T	T	T
0.9182341916896053	0.4682925097955946	0.8993911438527654	T	T	T
0.1676733042086364	0.6676256673202885	0.8996521637819335	T	T	T
0.4171225600352494	0.6676756545025581	0.8998806511924794	T	T	T
0.6668866290722797	0.6673151705161022	0.8998740622336810	T	T	T
0.9182527398781141	0.6675489300885958	0.8993895534104892	T	T	T
0.1671497112772069	0.8671933883388410	0.8994721015736232	T	T	T
0.4177484472803764	0.8683395006947788	0.9000120473693259	T	T	T
0.6672862696532672	0.8676416680661380	0.9000802288087110	T	T	T
0.9160399527940607	0.8658823855777417	0.8995238768248573	T	T	T
0.9950777621290421	0.9973382818482179	0.9962705017495188	T	T	T
0.2486849734705805	0.9975289741639894	0.9965102159127929	T	T	T
0.5004616384923388	0.0024981021499473	0.9974061671366522	T	T	T
0.7486386828278885	0.0012466428246149	0.9973930959129129	T	T	T
0.9948933030068721	0.1997552072379766	0.9961319867906147	T	T	T
0.2403594651835003	0.1900991266274330	0.9985628157849717	T	T	T
0.4995022896916329	0.2030042688586328	0.0004620359818089	T	T	T
0.7488150048611989	0.2019533919031453	0.9971062411659257	T	T	T
0.0004937090401082	0.4023613648329875	0.9966287346610878	T	T	T
0.2479735875125310	0.4042709351019129	0.0030718179085491	T	T	T
0.5155769509197367	0.4092513543600568	0.9990909674403776	T	T	T
0.7563117427047771	0.4037514434918533	0.9962890202713821	T	T	T
0.0026974371557151	0.6031092280968229	0.996936924385233	T	T	T
0.2515166713625355	0.6035895596507801	0.9970863860656506	T	T	T
0.5033711858893342	0.6061361212315078	0.9962105426990943	T	T	T
0.7561277400243601	0.6060849540592909	0.9963882743066557	T	T	T
0.0013861372350178	0.8015926086980966	0.9971244752354089	T	T	T
0.2511852288099807	0.8017703891486886	0.9971748030745634	T	T	T
0.5010377251424268	0.8031789401088398	0.9973703724921633	T	T	T
0.7503144235711318	0.8021499413146441	0.9974857264877639	T	T	T
0.3310459389934582	0.3383730736151710	0.0592516259227520	T	T	T
0.3995276113592569	0.2787429354188907	0.0732573215229035	T	T	T
0.4337857465143224	0.2478809920390599	0.1142380624680116	T	T	T

TS: structure84

```

structure84
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu      C      H
60      2      2

```

Selective dynamics

```

Direct
0.08333333333333357 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
0.1683462541830068 0.0680794896603258 0.9006948218142941 T T T
0.4182737299220522 0.0685030214014708 0.9003357557707491 T T T
0.6681683626971939 0.0673207386826656 0.9002144216950460 T T T
0.9181709945656168 0.0673205915896529 0.9002152913073912 T T T
0.1672011391092558 0.2672785181613794 0.9008741565917486 T T T
0.4170995617887721 0.2678420403674248 0.9002551349216046 T T T
0.6675137838561108 0.2679141710057433 0.9001215389259168 T T T
0.9171629578092115 0.2677549830721248 0.9001985411552035 T T T
0.1691100771840266 0.4661641683067174 0.9013196681314206 T T T
0.4173475550255961 0.4663508060757794 0.9012546583554697 T T T
0.6660665185593239 0.4669867647032671 0.9006929156674381 T T T
0.9169686456167554 0.4675504019859250 0.8999823049483936 T T T
0.1674177789155485 0.6671335597347712 0.8995085076544116 T T T
0.4173522226804304 0.6673761034520954 0.8996589154406233 T T T
0.6671924402994451 0.6673145550674764 0.8997301766468474 T T T
0.9182811241570714 0.6672932052955090 0.8992750512314955 T T T
0.1675918459708358 0.8668361128265385 0.8993244034195848 T T T
0.4179341102663254 0.8675133857867788 0.8998043779867478 T T T
0.6680151820115230 0.8672876151167075 0.9001552213017925 T T T
0.9173264691243042 0.8661757132806656 0.8996007412744900 T T T
0.9978310857764846 0.9977032114144131 0.9965747340711357 T T T

```

0.2512996727838014	0.9975346089984205	0.9961721915441052	T	T	T
0.5017727009280519	0.9999737283466289	0.9973664942522855	T	T	T
0.7506746242242786	1.0003826135389882	0.9976163984492332	T	T	T
0.9971648239735322	0.1990724707554541	0.9967600749188864	T	T	T
0.2450187905330377	0.1917108919974721	0.9993985174578605	T	T	T
0.5034076364501696	0.1979158083351088	-0.0021874507343826	T	T	T
0.7522357712411656	0.2005736511400839	0.9972001653578760	T	T	T
-0.0007619976052587	0.4017995806240813	0.9965171262428009	T	T	T
0.2476747941191213	0.4045377550635530	0.0019410432400055	T	T	T
0.5115773599156755	0.4110740934300312	0.9998924766290932	T	T	T
0.7517337236203167	0.4006649081352277	0.9982561776783809	T	T	T
0.0015004811571625	0.6019415216066051	0.9968781745299677	T	T	T
0.2511941854667202	0.6034513777661522	0.9966675681181788	T	T	T
0.5037018480841836	0.6063708924278236	0.9963249779276919	T	T	T
0.7567820234277225	0.6063765620624446	0.9962049789012630	T	T	T
0.0026696569959714	0.8014204978413514	0.9970735410523065	T	T	T
0.2512758144228937	0.8006762265115291	0.9969855885504288	T	T	T
0.5014322565885851	0.8021665186019911	0.9971924714131758	T	T	T
0.7517803616778241	0.8019230099322642	0.9974782621178304	T	T	T
0.3202342921682368	0.3362405104801517	0.0601799175997812	T	T	T
0.3987865707175608	0.2867800948721213	0.0802866853134866	T	T	T
0.4063404464881357	0.2446853381621160	0.1235054498030513	T	T	T
0.5480209104983869	0.3225739450939999	0.0526115451706655	T	T	T

```

FS: structure85
  structure85
    1.0000000000000000
      10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
      -6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
      0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
    Cu      C      H
    60      2      2
  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
    0.1679384457705932      0.0695835650671761      0.9009128001696516      T      T      T
    0.4168798511647637      0.0680015404442899      0.8998421240705105      T      T      T
    0.6673793042058563      0.0677908759931051      0.9001861544161269      T      T      T
    0.9172805503396576      0.0674861421865815      0.9000829432174792      T      T      T
    0.1675322030513879      0.2676062809291235      0.9001709424424585      T      T      T
    0.4177647824233063      0.2684804464040953      0.9003257979073388      T      T      T
    0.6682206456826171      0.2681119208935488      0.9000232758503199      T      T      T
    0.9179270832938111      0.2680780341680788      0.8999329358449054      T      T      T
    0.1693215217123256      0.4666601355833530      0.9008509497357740      T      T      T
    0.4176781961265305      0.4669697640908118      0.9002819617187319      T      T      T
    0.6652677217716874      0.4670929843743031      0.9013440387864867      T      T      T
    0.9183264005873976      0.4685290530984993      0.8994656078724709      T      T      T
    0.1676657400184824      0.6677294901898603      0.8998837417968107      T      T      T
    0.4176462809748255      0.6675481974704911      0.8997009036428002      T      T      T
    0.6675776541644898      0.6675452269212229      0.8998997390874084      T      T      T
    0.9179649663221741      0.6678221642765626      0.8996899139706572      T      T      T
    0.1672389210777477      0.8680099280655349      0.8999617106389015      T      T      T
    0.4174117802035391      0.8678296482075587      0.8999578272040392      T      T      T
    0.6674462832221604      0.8678020205461938      0.9001064281337036      T      T      T
    0.9172325995407207      0.8672869934255575      0.8997868742116436      T      T      T
    0.9997589448393295      0.0006698903398369      0.9968342100885431      T      T      T
    0.2507980774974880      0.0009998748419489      0.9970971976982312      T      T      T
    0.5010958592256897      0.0014155820330975      0.9973054652162102      T      T      T
    0.7500308022740885      0.0011308264725162      0.9974787479519270      T      T      T
    0.9964900566227870      0.1999985799976960      0.9963535299804780      T      T      T
    0.2491478005172831      0.1980015827610921      0.0010319117741028      T      T      T
    0.5020757756843124      0.2006909548418110      0.9964964031248453      T      T      T
    0.7505847566314648      0.2017170591958097      0.9970410730756215      T      T      T
    0.0015707161091919      0.4025245727082081      0.9962323074606489      T      T      T
    0.2509203416231537      0.4037968020194443      0.0011680046769679      T      T      T
    0.5095582956474238      0.4054331663862478      0.0018505172001857      T      T      T
    0.7542420498354279      0.4024681090367312      0.9965559757510966      T      T      T
    0.0027311195483672      0.6028454663989975      0.9970150622731156      T      T      T
    0.2519437555930911      0.6030634665573162      0.9969766624417061      T      T      T
    0.5032327396212870      0.6046970580915768      0.9961747224082602      T      T      T
    0.7547332962506221      0.6041972765911826      0.9968024707987210      T      T      T
    0.0019583494528214      0.8021989547228713      0.9972445127864821      T      T      T
    0.2513995409080660      0.8023228631570509      0.9975291819679952      T      T      T
    0.5016095594137562      0.8023583255793422      0.9972531677100542      T      T      T
    0.7517361888122621      0.8023721690650329      0.9973365709470716      T      T      T
    0.3335359336256681      0.3333432904259732      0.0590703449910656      T      T      T

```

0.3894255725301344	0.3562743628667369	0.1180548940159915	T	T	T
0.4081198079934379	0.2916732916308518	0.1445362562118659	T	T	T
0.4140449512306441	0.4385992115209534	0.1431797947800141	T	T	T

CCH_{ad} + H_{ad} = CHCH_{ad}

IS: structure83 + 1/2H₂

TS: structure86

```

structure86
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      H
60      2      2

```

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
0.1667285033065330	0.0670807151423505	0.9001710978674882	T	T	T
0.4180315810802296	0.0692341436300613	0.9009646823411381	T	T	T
0.6673967224339711	0.0670819505059005	0.9002386230073580	T	T	T
0.9166109411697927	0.0666730668148431	0.8998725299009864	T	T	T
0.1669104167331137	0.2667472662250485	0.9010571092662505	T	T	T
0.4166210187022533	0.2676418435573473	0.8999957302947218	T	T	T
0.6652665233234542	0.2673281873991177	0.9009739024294537	T	T	T
0.9160254799860287	0.2673780068760143	0.8998150780379944	T	T	T
0.1696759389324684	0.4658362421906573	0.9014198142999849	T	T	T
0.4166561760692675	0.4654668964377076	0.9006950986639299	T	T	T
0.6676590912173153	0.4674245667319499	0.8994868924042220	T	T	T
0.9192465289432439	0.4677807272235833	0.8991521161144256	T	T	T
0.1687567832163159	0.6672804038534891	0.8994624429464203	T	T	T
0.4178063643600040	0.6669864097240087	0.8998346756448872	T	T	T
0.6661638995622186	0.6663992422856673	0.8998704065272319	T	T	T
0.9191110449240023	0.6672281254090630	0.8990590191924152	T	T	T
0.1678274208432040	0.8669791691993161	0.8993771154977960	T	T	T
0.4181217534340372	0.8679312845525284	0.8999946933882456	T	T	T
0.6675228709588055	0.8666382096906564	0.9000700314512944	T	T	T
0.9162643050046829	0.8650916436604390	0.8994247296676307	T	T	T
0.9949298374721007	0.9957581739264972	0.9959759522823252	T	T	T
0.2488958370550777	0.9970228447525441	0.9962924161271758	T	T	T
0.5008238879275485	0.0010650596093428	0.9972498174522386	T	T	T
0.7490131975780473	0.9997561715751659	0.9975020695228182	T	T	T
0.9942042894258735	0.1979459223068913	0.9962204221134686	T	T	T
0.2400015124816770	0.1900965940718782	0.9983848165590589	T	T	T
0.4994912051022120	0.2019545205635780	0.0014102297047707	T	T	T
0.7491535674645406	0.2001829058482666	0.9970020898678371	T	T	T
0.0001217712126869	0.4006014906905417	0.9965892402750136	T	T	T
0.2433635980233669	0.3985267311973604	0.0035012806803474	T	T	T
0.5221343379250536	0.4093551123077858	0.9981670751541514	T	T	T
0.7588109049028062	0.4027199537686638	0.9959863715238787	T	T	T
0.0039166482861365	0.6022321671050361	0.9965045932467318	T	T	T
0.2511656914925302	0.6013795829341366	0.9966571782169446	T	T	T
0.5026210841667942	0.6026762240142235	0.9976580457941073	T	T	T
0.7589341225957704	0.6061519950335278	0.9958251169561624	T	T	T
0.0024352320917120	0.8009293158177992	0.9969105216186920	T	T	T
0.2519446043478802	0.8005393963016274	0.9969231883769726	T	T	T
0.5012060765836359	0.8012113505847919	0.9969958652830166	T	T	T
0.7499419122779353	0.8002989193509505	0.9971547379005044	T	T	T
0.3317030722679475	0.3320201532484902	0.0600105718229548	T	T	T
0.4079735933663411	0.2739748592424070	0.0687654108599424	T	T	T
0.4422751109599282	0.2460905503014810	0.1111705436030703	T	T	T
0.4093892725751034	0.4633984160149192	0.0464374208458359	T	T	T

FS: structure87

```

structure87
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      H
60      2      2

```

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
0.1661949824916294	0.0678299455596751	0.9007975617300427	T	T	T
0.4172824754173647	0.0691117374345846	0.9006274473573789	T	T	T
0.6665366716978310	0.0674895313972496	0.9001123209168833	T	T	T
0.9151713381832967	0.0665489873467606	0.8999087221312539	T	T	T
0.167565594811004	0.2662413894152083	0.9005996289960210	T	T	T
0.4163726207362801	0.2680134729170930	0.9002528032391108	T	T	T
0.6658624713661691	0.2670308388305423	0.9006330825963532	T	T	T
0.9174919513169107	0.2674734952374118	0.8995414876326419	T	T	T
0.1698959144159220	0.4654816868951920	0.9011217252202304	T	T	T
0.4186351980233090	0.4666124061719443	0.9004114621126155	T	T	T
0.6663318623492759	0.4669579056073540	0.9008526561754415	T	T	T
0.9185864125713422	0.4674746725271982	0.8994108340231414	T	T	T
0.1679152336434718	0.6668060996926378	0.8996734769400652	T	T	T
0.4174217931751052	0.6671190643315293	0.8997309652689317	T	T	T
0.6675581840986585	0.6670946709450187	0.8996874690427576	T	T	T
0.9189400415505677	0.6672005038814695	0.8993094748723393	T	T	T
0.1673796710605540	0.8671344289537131	0.8994777293485575	T	T	T
0.4170096314940904	0.8674634461583247	0.8998603466735537	T	T	T
0.6665319403033897	0.8670214234849447	0.9002332136414736	T	T	T
0.9159182864564707	0.8654878002330975	0.8994789167780134	T	T	T
0.9932895499539185	0.9956408117237344	0.9963500856742092	T	T	T
0.2483249303032105	0.9971722418410663	0.9963113156247094	T	T	T
0.5001062391696535	0.0014551859981428	0.9967610375486119	T	T	T
0.7479016614134274	0.0000750665133413	0.9975659202115279	T	T	T
0.9951961368669536	0.1985559766599331	0.9959924954651415	T	T	T
0.2358705909753036	0.1888405984393719	0.0012457203086497	T	T	T
0.4982448816995652	0.2038889834554261	0.0003673316920760	T	T	T
0.7492581523043329	0.2009447842326118	0.9962888033307419	T	T	T
0.0028024987120917	0.4009252493420486	0.9963032887216791	T	T	T
0.2543210179522175	0.3983616329141514	0.0002231122503123	T	T	T
0.5172233011083756	0.4129863003511265	0.0018540419859675	T	T	T
0.7573823195324425	0.4035144972468504	0.9963650195730921	T	T	T
0.0041554969812422	0.6018522575896161	0.9970260207671144	T	T	T
0.2521921712559591	0.6007016388976787	0.9967487304306432	T	T	T
0.5040577545071278	0.6047344692361587	0.9959595361749741	T	T	T
0.7587693352532515	0.6066668152414637	0.9963401219924218	T	T	T
0.0023977670748402	0.8011862347803916	0.9969832859188057	T	T	T
0.2513423989358869	0.8004430910650027	0.9971039087541966	T	T	T
0.5006782254377817	0.8014834751929978	0.9973103795321219	T	T	T
0.7500137420529366	0.8010593997654828	0.9974066428211116	T	T	T
0.3378424438277089	0.3325617746671080	0.0655455188705920	T	T	T
0.4134386323116253	0.2688802766662150	0.0655975682033247	T	T	T
0.4434787637409152	0.2426537502573285	0.1100373943795279	T	T	T
0.3064097923120329	0.3580168517539862	0.1098320606295771	T	T	T

CHCH_{ad} = CHCH

IS: structure87

TS: N/A

FS: structure88

```

structure88
1.0000000000000000
  10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
  -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015

```

Cu C H

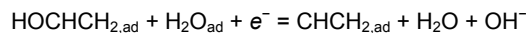
60 2 2

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
0.1672389236873766	0.0678248758769235	0.9000917684146417	T	T	T
0.4172199682804109	0.0677907802123896	0.9000249046472538	T	T	T
0.6672192046458768	0.0678083158624656	0.9000229928917750	T	T	T
0.9172108387127695	0.0677928943890189	0.9000430165489967	T	T	T
0.1668691254604896	0.2677350861716248	0.9000729482743299	T	T	T
0.4168313431260602	0.2677631308594652	0.9001035834726111	T	T	T
0.6668837619013920	0.2677639296181709	0.9000139986755424	T	T	T
0.9168746380299739	0.2677649756339144	0.9000088571465906	T	T	T
0.1665401662433824	0.4677638411545195	0.8999972139544437	T	T	T
0.4165676854898390	0.4677238654039539	0.9000734217886863	T	T	T
0.6665324373270896	0.4677319544797492	0.9000722232777407	T	T	T
0.9165717468712629	0.4677490369345824	0.9000057954099618	T	T	T
0.1667441534706484	0.6677862148001300	0.9000312846352790	T	T	T
0.4167231034016973	0.6677386102207225	0.9000448336962562	T	T	T
0.6667778629664618	0.6677956318391617	0.9000567290230670	T	T	T
0.9167543143090987	0.6677380749931008	0.9000506575904501	T	T	T
0.1671731097275101	0.8678039732545981	0.9000337009630679	T	T	T
0.4171934495326636	0.8677990050723794	0.9000245971547963	T	T	T
0.6671834188907005	0.8678058614742088	0.9000403619441469	T	T	T
0.9172290964729048	0.8678117173221246	0.9000327980808197	T	T	T
0.0007054708686359	0.0021230416135004	0.9971983986305377	T	T	T
0.2508494255617937	0.0021155190794911	0.9971715547248503	T	T	T
0.5008311105057393	0.0021569745235360	0.9971869326285675	T	T	T
0.7507733154540424	0.0021842076712936	0.9971914252929259	T	T	T
0.0003351343006652	0.2021967396138072	0.9971981375181583	T	T	T
0.2503448297904927	0.2021409505505730	0.9973129108710613	T	T	T
0.5005183496297120	0.2021403143289752	0.9971638680216280	T	T	T
0.7504410195914067	0.2021762599645753	0.9971913823801367	T	T	T
0.0000211097490831	0.4021892208191225	0.9971863358486796	T	T	T
0.2499038549503524	0.4022122380303512	0.9971481311648962	T	T	T
0.5000861317334406	0.4022329329291135	0.9972975109662269	T	T	T
0.7501170247092337	0.4021549642768165	0.9971796326203813	T	T	T
0.0001374485270692	0.6021451839001892	0.9971998343913575	T	T	T
0.2500525087793403	0.6021479146471785	0.9971853486266729	T	T	T
0.5000819996219297	0.6021939803325553	0.9971904698453394	T	T	T
0.7501743057764075	0.6021904881898837	0.9971979807437893	T	T	T
0.0005437675279334	0.8021703540241854	0.9971896136834351	T	T	T
0.2505694883964386	0.8021663986096674	0.9971880218950360	T	T	T
0.5004997277293641	0.8021892105156718	0.9971855446582103	T	T	T
0.7505355117180940	0.8022038376910199	0.9971903813484044	T	T	T
0.3413371943731311	0.3218901406611555	0.2071763123676365	T	T	T
0.4066651293798725	0.2656428908303933	0.2071931900556712	T	T	T
0.46464045149478623	0.2157352744397194	0.2073453824572565	T	T	T
0.2834067157969014	0.3717906175131677	0.2072993860263097	T	T	T



IS: structure89

```

structure89
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      4      10

```

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
0.1668302771200110	0.0671177288635035	0.8993463652980884	T	T	T
0.4162750438228685	0.0672961297560245	0.8997317511728242	T	T	T
0.6660873820073498	0.0674376320500418	0.8996648348806030	T	T	T
0.9165517905997328	0.0676629271204272	0.8996982721411327	T	T	T
0.1663097807108975	0.2677062269716208	0.8998059703912493	T	T	T
0.4170698924595370	0.2687573871735312	0.9013797605410087	T	T	T
0.6667085371549403	0.2677688340687560	0.8998491763227733	T	T	T
0.9163992013683118	0.2675465708481938	0.9000732677261362	T	T	T
0.1665492894999480	0.4676043918396723	0.8998091351826751	T	T	T
0.4177152157106024	0.4660571416617728	0.9021734755648169	T	T	T
0.6632040530681719	0.4661047434347306	0.9019912616343484	T	T	T
0.9162516494286237	0.4676332093229287	0.8998225452559795	T	T	T
0.1663895004802509	0.6674103986934922	0.8999463906051618	T	T	T

0.4161329365160133	0.6668859286913706	0.8995781943781163	T	T	T
0.6671908140753033	0.6687258412626599	0.9013656304867579	T	T	T
0.9158587191437830	0.6668910894528165	0.8996199180720788	T	T	T
0.1664897158219611	0.8671144437795119	0.8997146088960915	T	T	T
0.4163617317899090	0.8674322751054051	0.8996863001638211	T	T	T
0.6670973533914670	0.8666904893674015	0.9012404274411683	T	T	T
0.9150170740955358	0.8667548921980072	0.9009937765487872	T	T	T
0.0011269938182164	0.0031908194986836	0.9962809099438417	T	T	T
0.2492007585254235	0.0011449814931867	0.9969368658215355	T	T	T
0.4991917094023032	0.0010312800839747	0.9971309421882002	T	T	T
0.7496648052375220	0.0036767516249689	0.9963387358741564	T	T	T
-0.0009229429297997	0.2017426038420045	0.9975435976519842	T	T	T
0.2461630724947786	0.1997540600432407	0.9958634563430920	T	T	T
0.5002647797030333	0.1997152219555440	0.9959851826204296	T	T	T
0.7497228230651938	0.2017868095048545	0.9971551699296373	T	T	T
-0.0005551659358170	0.4019949175719661	0.9974109180105013	T	T	T
0.2470964314022087	0.4012418618184959	0.9968702590668115	T	T	T
0.4981035020580289	0.3988223402738351	0.0082054580589010	T	T	T
0.7510713497502719	0.4016628047372025	0.9970389343406071	T	T	T
-0.0005339159182267	0.6016645971566411	0.9973887885428487	T	T	T
0.2492445010986542	0.6017380110049202	0.9974103597705511	T	T	T
0.4980853476844484	0.6017540362021297	0.9966124033151408	T	T	T
0.7506091149308453	0.6017088223321364	0.9965993315121020	T	T	T
0.0013017814858754	0.8014588924803565	0.9965187446679732	T	T	T
0.2494342704923425	0.8013743870295560	0.9978706367918347	T	T	T
0.4971976570545278	0.8013475382115843	0.9965255631842387	T	T	T
0.7503189539681316	0.8031727878763627	0.0027425292199857	T	T	T
0.4481140472731901	0.4208145106007791	0.1335891914391509	T	T	T
0.4838006706645093	0.3358366384062196	0.1160466859429371	T	T	T
0.5479455184814224	0.5266575657053778	0.1581200267190283	T	T	T
0.4803962451865233	0.6930404116175859	0.1541823735013325	T	T	T
0.85967664889603764	0.6771053821995590	0.1508391891457245	T	T	T
0.7711161559714592	0.8270460048354984	0.1131595842867713	T	T	T
0.5090381853003201	0.5873131683795360	0.1584029463549568	T	T	T
0.4163357528941233	0.6851848765454400	0.1182140307600686	T	T	T
0.5829725495277023	0.7569316204791853	0.1413134257367222	T	T	T
0.5948721153616228	0.3484516667833220	0.1261142408461035	T	T	T
0.7568432261762270	0.6077549347643880	0.1554545729047101	T	T	T
0.9028470752077248	0.6576745449978419	0.1146113868799213	T	T	T
0.8180236409858532	0.7777828165127568	0.1283131265722910	T	T	T
0.8438035761146012	0.9115597438141589	0.1206826517009680	T	T	T
0.3326872486723430	0.4038314635022230	0.1293132216896206	T	T	T
0.3924159155580674	0.2442191570783112	0.1084012146111266	T	T	T

TS: structure90

```

structure90
  1.0000000000000000
    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      10

```

Selective dynamics

```

Direct
0.08333333333333357 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
0.1638340170982944 0.0657326147486617 0.9013397487519583 T T T
0.4166855714000504 0.0683065439715704 0.8996750057020713 T T T
0.6669248085659744 0.0678696778985060 0.8996398076438443 T T T
0.9180129430628223 0.0661717357712316 0.9018449600117789 T T T
0.1685370821355160 0.2689521401603946 0.9006680698008418 T T T
0.4169651978254232 0.2686374383727747 0.9008130276441897 T T T
0.6685772329087502 0.2681533826214256 0.8996454220517835 T T T
0.9182070925870970 0.2672115794479200 0.8998131336460770 T T T
0.1693483090774909 0.4658193619265087 0.9014321313785976 T T T
0.4183704934053954 0.4669224709537307 0.9035927810910033 T T T
0.6639591227075834 0.4658648149826988 0.9015006065672976 T T T
0.9175331531973259 0.4676353287534450 0.8998722462243017 T T T
0.1671987889972285 0.6672198482328676 0.8992438235690057 T T T
0.4183813124361692 0.6659278230714972 0.9007113121877591 T T T
0.6656226936679376 0.6660001636387800 0.9002864362321940 T T T
0.9174905158583191 0.6671051871371106 0.8988977254938096 T T T
0.1676083401372647 0.8675398613512266 0.8992623414761683 T T T
0.4165659926963360 0.8676898454435664 0.8992620755778490 T T T
0.6664612763875494 0.8674320717745839 0.8994545064091438 T T T
0.9176444878468146 0.8681086770528084 0.9006541634472632 T T T
0.9975580601744916 0.9983101459467381 0.0051544614136383 T T T

```

0.2520822283650846	0.0002832956022484	0.9964701270944912	T	T	T
0.5002499739704190	0.0019071006599797	0.9973085548261493	T	T	T
0.7474030588769979	0.0016148582364720	0.9965777905733880	T	T	T
0.9978836339149999	0.2007233413381740	0.9969328707659373	T	T	T
0.2440420412315695	0.1958498194507080	0.9951374853457423	T	T	T
0.50224803923976160	0.2004291928420456	0.9961864895052268	T	T	T
0.7505448172040359	0.2011761507784161	0.9969864265111276	T	T	T
0.0003254499355521	0.4014003267909306	0.9967854477210095	T	T	T
0.2482573165527270	0.3975438793863014	0.0045871448505020	T	T	T
0.5081363825631904	0.4002605920870351	0.0045570437075534	T	T	T
0.7535911067193974	0.4015488931258208	0.9976890592576064	T	T	T
0.0030235082844681	0.6016610981836107	0.9975623344291539	T	T	T
0.2485108189631939	0.6025148928102584	0.9955795126138685	T	T	T
0.5044938004776791	0.6069423596598236	0.0000046274951450	T	T	T
0.7579324699701223	0.6028352296227356	0.9950045300498535	T	T	T
0.0033974357669369	0.7997267990588470	0.9952377728711542	T	T	T
0.2515374309914602	0.8016781480653623	0.9974053662178296	T	T	T
0.4999099633538867	0.8047406012465113	0.9960965087096580	T	T	T
0.7512043862457857	0.8030210851310273	0.9946852006552078	T	T	T
0.3505317780136996	0.4093521195026969	0.0852026276921559	T	T	T
0.4339951113846189	0.3519262670716685	0.0982404102576825	T	T	T
0.5183766873425022	0.5879910528697209	0.0913124343313756	T	T	T
0.3546333663247810	0.6870910406892433	0.1471342324882614	T	T	T
0.8033542008444948	0.7287259038316115	0.1370826783149485	T	T	T
0.9714166676205802	0.9647613248451948	0.1070359077995363	T	T	T
0.4644132757918196	0.6245078815066100	0.1124529914039004	T	T	T
0.3215400044337302	0.7133331146007659	0.1100315212022165	T	T	T
0.4127774148715160	0.7597857020242098	0.1719134086114750	T	T	T
0.5132296630760251	0.3820359250046546	0.1376256959405372	T	T	T
0.6982757441329022	0.6734790917163612	0.1214171620968299	T	T	T
0.8601625865754430	0.6896388948905430	0.1249176851744684	T	T	T
0.9046357870783428	0.8773324506899015	0.1182700574284812	T	T	T
0.925534252443116	0.0077332721252680	0.1259373566610322	T	T	T
0.3028481668724903	0.4408042768959167	0.1215817116662946	T	T	T
0.3775925732770525	0.2539768394861883	0.0903800139990095	T	T	T

FS: structure91

structure91		
1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710640	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

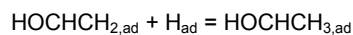
Cu	C	O	H
60	2	4	10

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
0.1653050859758555	0.0688828340281262	0.9027832978343215	T	T	T
0.4158115682766946	0.0665838948639601	0.8988768505664787	T	T	T
0.6680500037013452	0.0658787661173527	0.9016974273365377	T	T	T
0.9163054731585903	0.0662501880688950	0.9008684397515282	T	T	T
0.1674244223035549	0.2669699624471917	0.8991631897130020	T	T	T
0.4160672026431961	0.2675701320471506	0.9006102998770645	T	T	T
0.6673168954861569	0.2676499967176131	0.8988196818360655	T	T	T
0.9157861391248152	0.2678515666321875	0.8987911821107786	T	T	T
0.1680952805772207	0.4659161736973788	0.9001173168600570	T	T	T
0.4185997180080975	0.4681009281395464	0.9028771248057658	T	T	T
0.6628301229028377	0.4653140326708212	0.9010314434445946	T	T	T
0.9176867979032506	0.4683053835289941	0.8991903611640221	T	T	T
0.1671160601402346	0.6675385667537002	0.8989378677665697	T	T	T
0.4188671016525071	0.6665739066605955	0.9007979278758530	T	T	T
0.6648796163646451	0.6662884541365820	0.9014541960623327	T	T	T
0.9170349897241514	0.6672827696558622	0.8990045785533743	T	T	T
0.1674813280503762	0.8676270218018107	0.8990888957386836	T	T	T
0.4168213073621955	0.8670624399703271	0.8993533259291286	T	T	T
0.6693468571585511	0.8680517104282445	0.9021148689268206	T	T	T
0.9173210807521344	0.8679633856509177	0.9012405872392861	T	T	T
0.0032018431135372	0.0014737249590989	0.0008259056267517	T	T	T
0.2515388859161201	0.0004043408533157	0.9964142473566638	T	T	T
0.4986730945587641	0.9999887728511883	0.9971935165268125	T	T	T
0.7477843703405938	0.0025572074891541	0.0025040723731265	T	T	T
0.9976346725081874	0.2058597104694443	0.9930446417497277	T	T	T
0.2474823138806251	0.2012866154908530	0.0013084120347355	T	T	T
0.5029157594589323	0.1979395942650367	0.9937006514377345	T	T	T
0.7500451193230859	0.2029564584546282	0.9962865148755971	T	T	T
-0.0006811935243129	0.4025833838887584	0.9967162166934720	T	T	T

0.2463346893898208	0.3995998725796238	0.9974307784085777	T	T	T
0.5073365116884683	0.4025113151467591	0.0027875480808076	T	T	T
0.7526017812415499	0.4009961319987825	0.9959747126748967	T	T	T
0.0015544874681302	0.6016416490944311	0.9973354741218204	T	T	T
0.2461409244044842	0.6006247441983146	0.9949200723861801	T	T	T
0.4971503834397929	0.6026553499650475	0.0028248493692799	T	T	T
0.7548474073107023	0.6002415365946349	0.9956227586196899	T	T	T
0.0034517766281829	0.7997104188952118	0.9958472994461974	T	T	T
0.2498589383215379	0.8007136418082088	0.9968984274955194	T	T	T
0.4984246655347099	0.8029960766001043	0.9956151143576276	T	T	T
0.7497651230814300	0.7954295024530031	0.9974072303679548	T	T	T
0.3328259525082075	0.3221939726166821	0.0704680970254569	T	T	T
0.4489217615709601	0.3325088963932430	0.1072346209229274	T	T	T
0.4930533611130071	0.6136261566056032	0.1019968344344185	T	T	T
0.2828129393504986	0.6741244933089431	0.1430319208546267	T	T	T
0.7747817933992119	0.7955259953102667	0.1187047232369267	T	T	T
0.8823514057792806	0.0094771372577769	0.0763899963539653	T	T	T
0.4182022947556767	0.6351177308221202	0.1178842405275768	T	T	T
0.2037718173283261	0.6434734689538129	0.1107097892227609	T	T	T
0.3288861231792026	0.7612166687857143	0.1389413538181959	T	T	T
0.4908073956969038	0.3944489659997455	0.1472095531741774	T	T	T
0.5944741119630009	0.6810816565022726	0.1137912963410549	T	T	T
0.8571505559036953	0.7786554601294280	0.1206394245782483	T	T	T
0.8215191925058228	0.8854037842823923	0.1095603279140287	T	T	T
0.930486651268389	0.0834448933552888	0.1009923725991609	T	T	T
0.2880635587412836	0.3786393119596868	0.0898699649371089	T	T	T
0.4952321878233577	0.2725111275518370	0.1025802490218730	T	T	T



IS: structure80 + 1/2H₂

TS: structure92

structure92			
1.0000000000000000			
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015	

Cu C O H

60 2 2 7

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
0.1673496553050333	0.0674475686717804	0.8996065326498598	T	T	T
0.4170679013969694	0.0674679168472731	0.9001007843565915	T	T	T
0.6669333075748530	0.0674872557829654	0.8998562057897053	T	T	T
0.9174677281574889	0.0672816883185660	0.9002964753861791	T	T	T
0.1674841216071527	0.2673716332362467	0.9000989496039141	T	T	T
0.4158959247788310	0.2668912045631222	0.9005259286746630	T	T	T
0.6674025854311546	0.2679132346625027	0.8996373933087796	T	T	T
0.9173289593509409	0.2676830064305163	0.8998676575239168	T	T	T
0.1671530927394443	0.4677870751374678	0.8996685974095957	T	T	T
0.4174614083952838	0.4677164364430766	0.8996060779258290	T	T	T
0.6670707144331460	0.4674277013705285	0.8998927523810394	T	T	T
0.9171124197176259	0.4677143100134948	0.9000293375254225	T	T	T
0.1670583770845546	0.6674540860475107	0.9000515531058021	T	T	T
0.4173073978372620	0.6676948615068929	0.8998603288471484	T	T	T
0.6672377137715901	0.6676555273704532	0.8999625388711459	T	T	T
0.9171608901688189	0.6677222130071321	0.8999679707137548	T	T	T
0.1671561361940436	0.8674361846416473	0.9001280645835326	T	T	T
0.4175383615770215	0.8674772136922008	0.9001462415655781	T	T	T
0.6669557009894357	0.8674912248233191	0.9000690220244570	T	T	T
0.9176616213340740	0.8686325615867213	0.9006951376864282	T	T	T
0.0041271931824053	0.0042501962933786	0.0000663370223188	T	T	T
0.2509370966041703	0.0010350686399046	0.9970921746569030	T	T	T
0.5005485569778783	0.0014084492155375	0.9970136536204549	T	T	T
0.7506135944114617	0.0016377678465540	0.9965791469356755	T	T	T
0.9994889137567595	0.2029776815554075	0.9967652042568271	T	T	T
0.2491914731540935	0.1998597398168812	0.9988053517812169	T	T	T
0.5025966530912109	0.2021306548201718	0.9965140791105164	T	T	T
0.7507542532266801	0.2019868801592339	0.9968839972759322	T	T	T
0.0013133392542710	0.4025726715207937	0.9971518660064305	T	T	T
0.2514137407183170	0.4026657200169297	0.9963939214455614	T	T	T
0.5002051988523470	0.4015613227879856	0.9967633569427251	T	T	T
0.7509501095124513	0.4021276875409661	0.9970666937529858	T	T	T

0.0009063019575962	0.6017974901502748	0.9973154961178287	T	T	T
0.2516117734119646	0.6018688033343726	0.9973987742059596	T	T	T
0.5009998260164847	0.6020556017695460	0.9971913308065600	T	T	T
0.7504901050120174	0.6017088506096795	0.9970845262037806	T	T	T
0.0004091326310023	0.8011260386850035	0.9973164078708904	T	T	T
0.2506511964249045	0.8014068522655371	0.9973890878238362	T	T	T
0.5006310032407132	0.8013230135387096	0.9975266497830149	T	T	T
0.7519654983763686	0.8026206850028726	0.9970444384206899	T	T	T
0.2431881604577302	0.2364838836378342	0.1482846164542861	T	T	T
0.1769667401915974	0.1147333089044050	0.1359865894032759	T	T	T
0.1614978141573491	0.2888347545277172	0.1561809560398162	T	T	T
0.3351259353007311	0.5240364651354904	0.1508848979387795	T	T	T
0.2269576125233063	0.3800304790597666	0.1562308136832416	T	T	T
0.2910447171147806	0.5712136548872130	0.1659444639527042	T	T	T
0.0579037033969550	0.0571903727452021	0.1467173090948782	T	T	T
0.2480883469825800	0.0742645118699121	0.1390632531840232	T	T	T
0.3558944465781388	0.5448949714841637	0.1058055486213560	T	T	T
0.3655484795300098	0.2952133800802091	0.1466941416834541	T	T	T
0.1501620310475157	0.0988023543377106	0.0627479302542878	T	T	T

FS: structure93
 structure93
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -6.4258328740327499 11.1298690187710996 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
 Cu C O H
 60 2 2 7
 Selective dynamics
 Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.1695753682140635	0.0713170865699368	0.9017518097760596	T	T	T
0.4171456766721032	0.0677661160270575	0.8997613205678767	T	T	T
0.6678568005558736	0.0681245758505040	0.9000980307867888	T	T	T
0.9176948712548086	0.0680580026404804	0.8998799654013065	T	T	T
0.1684735337002166	0.2684297070038072	0.9020696918097918	T	T	T
0.4172217416749752	0.2678244592188552	0.9000802811703125	T	T	T
0.6678556350724941	0.2685360781800919	0.8998467868167687	T	T	T
0.9172564348519547	0.2683068413139373	0.8999092696231875	T	T	T
0.1681937693847801	0.4673689280504128	0.9009292123688265	T	T	T
0.4154364505262902	0.4667909528246040	0.9015728831207886	T	T	T
0.6643125177906448	0.4671233705460823	0.9009123197417763	T	T	T
0.9172853773135546	0.4689064569198143	0.8994503429586318	T	T	T
0.1666049471945818	0.6678969709024806	0.8997146082535532	T	T	T
0.4171950016532563	0.6684627535162830	0.8993422807047584	T	T	T
0.6676023683040412	0.6682780301173921	0.8995376008396752	T	T	T
0.9166884893605486	0.6680638811738437	0.8998761374461537	T	T	T
0.1669495185450142	0.8680709147460755	0.8997345557399232	T	T	T
0.4171119878210592	0.8677928254288975	0.9000339678235271	T	T	T
0.6674400245380980	0.8679900774687830	0.9001131228531500	T	T	T
0.9177309302248490	0.8683887498155400	0.8998878352292078	T	T	T
0.0022669485115347	0.0035516581012288	0.9968054244756673	T	T	T
0.2511248988229405	0.0012915761330781	0.9966738857693797	T	T	T
0.5009785356669715	0.0014337403475307	0.9973887843921357	T	T	T
0.7504098621714039	0.0016626909504700	0.9974120634773206	T	T	T
0.99648404440483285	0.2003679845860016	0.9960827453201729	T	T	T
0.2595792891296556	0.2064019541959853	0.0036971207964489	T	T	T
0.5039641548545540	0.2002158550407133	0.9958979502663187	T	T	T
0.7509926233576529	0.2021454588265914	0.9973032607959572	T	T	T
0.9974668014568535	0.4031923803950174	0.9963771335414572	T	T	T
0.2451893595623479	0.4051365481214892	0.0005858886553549	T	T	T
0.5015524755571608	0.4005948141092515	-0.0008105657125619	T	T	T
0.7517849874753825	0.4028317580937908	0.9968717117599365	T	T	T
0.0005244974867872	0.6034922534766811	0.9970429490882117	T	T	T
0.2516061665433154	0.6056599201642647	0.9966471020991514	T	T	T
0.5028503225240833	0.6056756823530268	0.9956322965841622	T	T	T
0.7499405089858766	0.6028436175846442	0.9970315009565799	T	T	T
0.0005569180503750	0.8026656866956331	0.9970622383421435	T	T	T
0.2504728827891282	0.8027369303563772	0.9973575584952885	T	T	T
0.5009512449377373	0.8026123343391927	0.9977246360430531	T	T	T
0.7517895712723655	0.8033013877046691	0.9974353921973558	T	T	T
0.3409125552348597	0.3054990438511678	0.0885075648832742	T	T	T
0.2996219358178425	0.2067468757429229	0.1369397744248664	T	T	T
0.2493070123079912	0.3614099303288472	0.0960856920823806	T	T	T
0.3814992885343251	0.5803155132251140	0.1504437328934692	T	T	T
0.3030223562242638	0.4387640858970409	0.1204714493085655	T	T	T

0.3058611564012310	0.5952910955158202	0.1691888867312530	T	T	T
0.3123959094546576	0.2441547918299506	0.1847611863606330	T	T	T
0.3743019942996407	0.1688712562158278	0.1322871712235306	T	T	T
0.4155822791655036	0.6315495215932428	0.1126935580644722	T	T	T
0.4603442653260757	0.3755430884695746	0.0965437347854821	T	T	T
0.1832017293131393	0.1331632049776620	0.1316751532269767	T	T	T

HOCHCH_{2,ad} + H_{ad} = HOCH₂CH_{2,ad}

IS: structure80 + 1/2H₂

TS: structure94

```

structure94
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      2      7

```

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
0.1690325659554431	0.0704163708867986	0.9015707438033989	T	T	T
0.4173924039312885	0.0681290008777745	0.8998926137842782	T	T	T
0.6678588463120492	0.0683478332475668	0.8998698715662371	T	T	T
0.9178689418064910	0.0678997057096700	0.9000200723276603	T	T	T
0.1687766276288613	0.2670533783698981	0.9022362551835482	T	T	T
0.4143727130354255	0.2669173818397800	0.9021909057673809	T	T	T
0.6678117230670084	0.2687956431412966	0.8994150505444634	T	T	T
0.9180225759797032	0.2687939596063562	0.8995873738697628	T	T	T
0.1676360492725374	0.4679401740628523	0.8996910223009169	T	T	T
0.4180484621642494	0.4687121068784548	0.8992252165949289	T	T	T
0.6657417644719062	0.4673742648326867	0.9003154754072789	T	T	T
0.9171999043174299	0.4684482011010439	0.8997496437371753	T	T	T
0.1670674382741213	0.6682010508227159	0.8997013861915640	T	T	T
0.4174607593717439	0.6683128154715575	0.8995584928840566	T	T	T
0.6682745183644039	0.6685243617008919	0.8997124304862762	T	T	T
0.9175138816721344	0.6682508900364824	0.8997048413659174	T	T	T
0.1677058698357696	0.8691932712664239	0.9001446448783508	T	T	T
0.4177259125919753	0.8680373635002704	0.8999964184656456	T	T	T
0.6670547798321217	0.8678604633437698	0.9000372446098831	T	T	T
0.9186645685506558	0.8693313598971173	0.9004341120669063	T	T	T
0.0015797624811785	0.0037385108035561	0.9981516259766356	T	T	T
0.2525351242637682	0.0022348631840501	0.9972180665564575	T	T	T
0.5018702357692149	0.0019304099720268	0.9969476740036537	T	T	T
0.7504364987496263	0.0020833096074034	0.9968637376129844	T	T	T
0.9973891133887858	0.2030699978183199	0.9961432094895193	T	T	T
0.2489624759248954	0.1978182724419026	0.0084738421368699	T	T	T
0.5063164958446265	0.2021929314141576	0.9958775200143817	T	T	T
0.7518171141159554	0.2029382963938139	0.9967772304416158	T	T	T
0.0019406835927583	0.4038824676442914	0.9965632789292092	T	T	T
0.2530754445814278	0.4062471628136954	0.9963274881948713	T	T	T
0.5011986022821069	0.4042470063684764	0.9977406457159481	T	T	T
0.7513630891409013	0.4033636515267158	0.9967909605531322	T	T	T
0.0013501922078957	0.6029640663032019	0.9970081728685075	T	T	T
0.2519571171283533	0.6039728518885044	0.9968775764017883	T	T	T
0.5029735836002630	0.6054625522827315	0.9962471694926995	T	T	T
0.7511809284186681	0.6030858272266650	0.9969722026008840	T	T	T
0.0010915763584599	0.8020926544905737	0.9969296948854509	T	T	T
0.2507516670271215	0.8026764359932028	0.9972080579990394	T	T	T
0.5008578454086506	0.8024385789776020	0.9974944454316294	T	T	T
0.7528472369552595	0.8036362023435707	0.9971529604564942	T	T	T
0.2830034816772536	0.2670481361091078	0.1161703880767450	T	T	T
0.2046444735939886	0.1388216288005172	0.1021685470879418	T	T	T
0.1947909466839941	0.3104401837003948	0.1384861174170098	T	T	T
0.3517808325435897	0.5533553409823869	0.1515555964770677	T	T	T
0.2547122686956198	0.3997229741500953	0.1449517870358897	T	T	T
0.2954820306720023	0.5871308454608634	0.1711952182552086	T	T	T
0.0863333204771632	0.0912705336957294	0.1158680017371118	T	T	T
0.2646035419085658	0.0917299164986669	0.1148553349961312	T	T	T
0.3725350720092244	0.5863198683379935	0.1085272402399265	T	T	T
0.3949801322835566	0.3044842108801686	0.1377216049739891	T	T	T
0.3454716531340564	0.3320122435940963	0.0589741186319182	T	T	T

FS: structure95

structure95

```

1.000000000000000
10.2813325984523996      0.000000000000000      0.000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.000000000000000
0.000000000000000      0.000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      2      7
Selective dynamics
Direct
0.0833333333333357      0.1333333333333329      0.8029049805823902      F      F      F
0.3333333333333286      0.1333333333333329      0.8029049805823902      F      F      F
0.5833333333333357      0.1333333333333329      0.8029049805823902      F      F      F
0.8333333333333286      0.1333333333333329      0.8029049805823902      F      F      F
0.0833333333333357      0.3333333333333357      0.8029049805823902      F      F      F
0.3333333333333286      0.3333333333333357      0.8029049805823902      F      F      F
0.5833333333333357      0.3333333333333357      0.8029049805823902      F      F      F
0.8333333333333286      0.3333333333333357      0.8029049805823902      F      F      F
0.0833333333333357      0.5333333333333314      0.8029049805823902      F      F      F
0.3333333333333286      0.5333333333333314      0.8029049805823902      F      F      F
0.5833333333333357      0.5333333333333314      0.8029049805823902      F      F      F
0.8333333333333286      0.5333333333333314      0.8029049805823902      F      F      F
0.0833333333333357      0.7333333333333343      0.8029049805823902      F      F      F
0.3333333333333286      0.7333333333333343      0.8029049805823902      F      F      F
0.5833333333333357      0.7333333333333343      0.8029049805823902      F      F      F
0.8333333333333286      0.7333333333333343      0.8029049805823902      F      F      F
0.0833333333333357      0.9333333333333300      0.8029049805823902      F      F      F
0.3333333333333286      0.9333333333333300      0.8029049805823902      F      F      F
0.5833333333333357      0.9333333333333300      0.8029049805823902      F      F      F
0.8333333333333286      0.9333333333333300      0.8029049805823902      F      F      F
0.1681825606947514      0.0701421386485290      0.9009321790496552      T      T      T
0.4168596578665912      0.0684405373389527      0.8999568801118624      T      T      T
0.6671337660009722      0.0680361156976695      0.9000717183489380      T      T      T
0.9179517425112587      0.0684937615911646      0.8999516798207581      T      T      T
0.1688172510767921      0.2684729106040784      0.9028826254512791      T      T      T
0.4151129551859211      0.2674238044884215      0.9007046444348749      T      T      T
0.6670207163146633      0.2683606494018008      0.9001542893777831      T      T      T
0.9171115684969736      0.2681128085274120      0.9001801308445961      T      T      T
0.1678216318538968      0.4666156713779753      0.9015921394663261      T      T      T
0.4146633082415109      0.4671114949369315      0.9011261953404196      T      T      T
0.6669832851214824      0.4681655350887482      0.8996756581592669      T      T      T
0.9171847125780563      0.4683900589768311      0.8996673442819967      T      T      T
0.1666263658394162      0.6680167191526725      0.8995204266067792      T      T      T
0.4168720114033609      0.6680570639895479      0.8993747870858531      T      T      T
0.6672727473231548      0.6681734137326225      0.8996550033430658      T      T      T
0.9168280507611003      0.6679912547452880      0.8998037190548887      T      T      T
0.16659256162226405      0.8678795007806491      0.8997558068462939      T      T      T
0.4169504422282325      0.8679905660490269      0.8998527960121402      T      T      T
0.6671116599685297      0.8679866062675577      0.8999453797434147      T      T      T
0.9173253066985989      0.8680636340010167      0.8998728473851302      T      T      T
-0.0015469888900913      0.0007330820548587      0.9964058721343521      T      T      T
0.2505103779472664      0.0000037197268804      0.9963841788851975      T      T      T
0.5005705453943465      0.0018421697884854      0.9971532852863595      T      T      T
0.7493810468350937      0.0016624045572068      0.9971874683429762      T      T      T
0.9962455075356880      0.2005387913677636      0.9966706157655110      T      T      T
0.2527856741941902      0.2006029179375567      0.0044210981297487      T      T      T
0.5029610632351909      0.2021572019174303      0.9968008023038691      T      T      T
0.7499277520967770      0.2023147766760718      0.9975786963314541      T      T      T
-0.0022509545739353      0.4026868622885256      0.9966782867211731      T      T      T
0.2503225724479911      0.4044724451167152      0.0024544428925596      T      T      T
0.5049280366799039      0.4045346580892804      0.9957155993466331      T      T      T
0.7510958918062947      0.4030033330934332      0.9972756635624659      T      T      T
0.0004468084651421      0.6030456904159469      0.9969519128775773      T      T      T
0.2509838669287044      0.6053167835673464      0.9962521979770305      T      T      T
0.5025838162574476      0.6053450853388472      0.9961591820361131      T      T      T
0.7509879893168090      0.6033368313441143      0.9972317358972749      T      T      T
0.0001729960510055      0.8021825084196965      0.9970448123013160      T      T      T
0.2500826188248433      0.8022945817545600      0.9972702609296339      T      T      T
0.5000552225494840      0.8025259309823549      0.9972388310401294      T      T      T
0.7503827353011003      0.8024987744104923      0.9974615909675416      T      T      T
0.3198861430265412      0.3277672467364783      0.1282591233867847      T      T      T
0.2607419782924114      0.2050373506331798      0.0995447493451370      T      T      T
0.2463320111082247      0.3885600152600009      0.1010924341211196      T      T      T
0.3531599668645614      0.6140118076461264      0.1481799363954486      T      T      T
0.2836094144809836      0.4686080153085826      0.1216623803064511      T      T      T
0.2744811574342573      0.6320817942205693      0.1592299504204285      T      T      T
0.1451835928986406      0.1424167177702523      0.1151220710757825      T      T      T
0.3318376569684367      0.1676273829249771      0.1140004866210498      T      T      T
0.4014504926380330      0.6637127219835819      0.1108074565059343      T      T      T
0.2966180144321028      0.3205969500362807      0.1793063447889705      T      T      T
0.4427498146884230      0.3835416408458880      0.1214976073072348      T      T      T

```

CCH_{2,ad} + H_{ad} = CHCH_{2,ad}

IS: structure85 + 1/2H₂

TS: structure96

```

structure96
1.000000000000000
10.2813325984523996      0.000000000000000      0.000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.000000000000000
0.000000000000000      0.000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      H
60      2      3
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
0.1675437559937857	0.0692988955540255	0.9007489341934152	T	T	T
0.4168259534109839	0.0685064457054728	0.8998258564902465	T	T	T
0.6670872640987198	0.0682727488098318	0.9001682766711195	T	T	T
0.9160012416548384	0.0672406650257179	0.8997399662614147	T	T	T
0.1679976201006602	0.2669107742551300	0.9001945142873317	T	T	T
0.4187639112316079	0.2694777679619210	0.9003084253885928	T	T	T
0.6672656620435933	0.2682666237096716	0.9005369758720997	T	T	T
0.9179651702586061	0.26830887844499237	0.8998460273602622	T	T	T
0.1704083714499663	0.4656637243724313	0.9013874135464899	T	T	T
0.4183930900769410	0.4668616035343819	0.9007291294610994	T	T	T
0.6676937722108354	0.4681049121256982	0.9008555426083396	T	T	T
0.9199700098712520	0.4686565094000572	0.8995231616602174	T	T	T
0.1685031052256632	0.6676175912825700	0.8997838929823258	T	T	T
0.4176372500939376	0.6675024653925204	0.8995091023926972	T	T	T
0.6679527725969011	0.6675262635979663	0.8997255928574036	T	T	T
0.9195504654860047	0.6681932636891899	0.8994616735778257	T	T	T
0.1675644454100412	0.8685496100612438	0.8999315175387917	T	T	T
0.4173501259073552	0.8678267869897932	0.8998614703019596	T	T	T
0.6669388746112654	0.8676469504399632	0.9001907795562475	T	T	T
0.9165799632011229	0.8666985756325002	0.8995903320476079	T	T	T
0.9956352156072532	0.9987631284539935	0.9963428456029938	T	T	T
0.2502400225324186	0.0004759129790614	0.9973014015107592	T	T	T
0.5004509130158826	0.0014245296567333	0.9970841716519131	T	T	T
0.7481672148689869	0.0007535548840237	0.9974313428503826	T	T	T
0.9930092997675389	0.1987451902956079	0.9960669959807434	T	T	T
0.2405763775894551	0.1958614620370167	0.0000765275849513	T	T	T
0.4998902025678579	0.2004429216444097	0.9978207812962897	T	T	T
0.7489923737465640	0.2021664094812635	0.9971821871341081	T	T	T
0.0029363203122459	0.4017978212191461	0.9968073401825823	T	T	T
0.2517862132740883	0.3991955203382987	0.0019717153985270	T	T	T
0.5194461193416134	0.4140416017414640	0.0006462295790811	T	T	T
0.7573671663820987	0.4036785307181093	0.9965926652770827	T	T	T
0.0051480860797247	0.6031876807133532	0.9970750966555240	T	T	T
0.2529023436610682	0.6012160281840642	0.9970391587827858	T	T	T
0.5045278334552276	0.6069058250066622	0.9957741965340089	T	T	T
0.7599398232210247	0.6077704814922319	0.9966608091921594	T	T	T
0.0038799454904818	0.8032090841594817	0.9971389614162761	T	T	T
0.2520966325773213	0.8019638893757278	0.9971952700108528	T	T	T
0.5011450008179864	0.8025430323437160	0.9973001114946112	T	T	T
0.7517690074524480	0.8025866215142983	0.9973826918472579	T	T	T
0.3421063736112608	0.3292013038174092	0.0591522267587219	T	T	T
0.4363497726854633	0.3769790734196752	0.1092399199681706	T	T	T
0.4803798525147553	0.3288499318547315	0.1361890057930406	T	T	T
0.4606482042581346	0.4640751480021275	0.1282280659158321	T	T	T
0.3562291739710420	0.2001879873662722	0.0508712660617080	T	T	T

```

FS: structure97
  structure97
    1.0000000000000000
      10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
      -6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
      0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
    Cu      C      H
    60      2      3
  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
0.1679369643368356	0.0698143560012339	0.9005751981830967	T	T	T
0.4173406300848083	0.0680219155048195	0.8996013721904609	T	T	T
0.6672808815386205	0.0684180153665025	0.9001302142147918	T	T	T
0.9170582608955096	0.0678832023001801	0.8998767887857991	T	T	T
0.1676040534101068	0.2685615299850321	0.9001630934083644	T	T	T
0.4186109698572049	0.2694750466701540	0.9008975004903599	T	T	T
0.6688508401874637	0.2687781511891290	0.8998217862173423	T	T	T
0.9179790675347989	0.2689631851043044	0.8998915715331370	T	T	T
0.1696757675437618	0.4666348481493044	0.9017421520277484	T	T	T
0.4172614722909379	0.4674444825409922	0.9015658702051325	T	T	T
0.6641332826324418	0.4671174469141537	0.9020625125055993	T	T	T
0.9178001035371091	0.4687918985022911	0.8996637494440898	T	T	T
0.1670846933475810	0.6679907447916580	0.8997693537159445	T	T	T
0.4169114275979367	0.6682421758973490	0.8993992864757215	T	T	T
0.6680611363926677	0.6681872251678804	0.8994010040965211	T	T	T
0.9175677427147954	0.6681119467436466	0.8997472175090216	T	T	T
0.1672784266909736	0.8686186127931900	0.8997809088766148	T	T	T
0.4171411489106583	0.8680100917066625	0.8998911471192461	T	T	T
0.6671540252277975	0.8681515266652893	0.9000741340079912	T	T	T
0.9173611117175938	0.8681048943064984	0.8997523132275028	T	T	T
0.0006161220062238	0.0024788658940770	0.99692555959320866	T	T	T
0.2515222975536069	0.0027891050596358	0.9968128019320438	T	T	T
0.5012256411414363	0.0020778671916911	0.9971837140952885	T	T	T
0.7503278118491953	0.0018991587838832	0.9974841988471745	T	T	T
0.9960178993764001	0.2007231415820638	0.9959479817721772	T	T	T
0.2498250909301255	0.2010408128022627	0.9976911247272865	T	T	T
0.5031623460065023	0.2007417434077034	0.9958179259897041	T	T	T
0.7508592135020447	0.2024774685314225	0.9971753901032332	T	T	T
0.0007234429240616	0.4030158939307978	0.9967489057366958	T	T	T
0.2483114222921704	0.4015301281830789	0.0032357638944269	T	T	T
0.5063581764153863	0.4027133303740485	0.0039153711619938	T	T	T
0.7534250790087121	0.4030486265886033	0.9969210647584732	T	T	T
0.0022551115716649	0.6035428717436166	0.9970435744805473	T	T	T
0.2520549878072861	0.6038290661489752	0.9967329054608124	T	T	T
0.5049106796742246	0.6085931234527532	0.9946266284686661	T	T	T
0.7534990087863506	0.6047619809701135	0.9967800560361127	T	T	T
0.0022911000673306	0.8034041678536114	0.9970238700012442	T	T	T
0.2513094736161301	0.8032615640205599	0.9971065572160701	T	T	T
0.5012233544239880	0.8036234467751383	0.9972858952166737	T	T	T
0.7529953296997328	0.8039930381621357	0.9972239782770387	T	T	T
0.3323403224543124	0.3473458363842085	0.0724173677039136	T	T	T
0.4497731871066002	0.4244454778662761	0.1102819964013360	T	T	T
0.4837120312838329	0.3920598857124917	0.1512972883825171	T	T	T
0.5072799517488457	0.5222695894514601	0.1049811478159554	T	T	T
0.2757253402159324	0.2541437499315183	0.0915615366404672	T	T	T

CCH_{2,ad} + H_{ad} = CCH_{3,ad}

IS: structure85 + 1/2H₂

TS: structure98

```

structure98
1.0000000000000000
  10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
   -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
Cu      C      H
60      2      3

```

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
0.1676989160757480	0.0687589377239137	0.9010108773941854	T	T	T
0.4170682135121322	0.0670577362737045	0.8995256902955149	T	T	T
0.667652049875511	0.0676141061768741	0.9001971309840383	T	T	T
0.9172411290983936	0.0669871824745648	0.9002084941723394	T	T	T
0.1660295479156452	0.2670006869270887	0.9002310927104432	T	T	T
0.4171532516078649	0.2679784890548033	0.9007576262134719	T	T	T
0.6676550851880726	0.2685300956368894	0.9005908593793328	T	T	T
0.9171095713234172	0.2677375775978812	0.9002527126664163	T	T	T
0.1689001569649116	0.4655872758155427	0.9012440792621921	T	T	T
0.4170149334680722	0.4658537153092386	0.9010565364878541	T	T	T
0.6672426044345829	0.4672722494260227	0.9000185555377327	T	T	T
0.9178568341613094	0.4678081081687565	0.9001922927487083	T	T	T
0.1676255620291854	0.6670314284153154	0.8996976131267854	T	T	T

0.4168030914892258	0.6670985811208598	0.8994025389336296	T	T	T
0.6669305201770370	0.6664551091962740	0.9000645309928805	T	T	T
0.9181836095649191	0.6675034161723797	0.8997540598790038	T	T	T
0.1673139930566835	0.8674714840106158	0.8998168334648178	T	T	T
0.4172551916045070	0.8672304431096656	0.8999464772647260	T	T	T
0.6671504072035032	0.8672266624598334	0.9000748842496505	T	T	T
0.9166553900456325	0.8664644240387878	0.8996889817496676	T	T	T
0.9982843950108100	0.9987948765933403	0.9966958394774835	T	T	T
0.2494288396165291	0.9992077196019661	0.9970698669946779	T	T	T
0.5004914082337627	0.9999433533201256	0.9974021189738828	T	T	T
0.7488355210113915	0.9999180034583466	0.9973791193668974	T	T	T
0.9943756464515914	0.1984715495284759	0.9967651912125816	T	T	T
0.2459066322986878	0.1955026250868787	0.0017804912625279	T	T	T
0.4991064869653803	0.1962417724917775	0.9958083833495265	T	T	T
0.7491351585837879	0.2008996883874031	0.9974291218157720	T	T	T
1.0002102065234593	0.4013259039139326	0.9966318264548077	T	T	T
0.2489278587875123	0.4017325478483425	0.0032392611648858	T	T	T
0.5129943974793678	0.4059893965003853	0.9985848379412163	T	T	T
0.7539608010206509	0.4028921338887207	0.9993756517615070	T	T	T
0.0036686808141935	0.6024246939165814	0.9970073106398424	T	T	T
0.2506368064982105	0.6016670308495008	0.9969765305859537	T	T	T
0.5007790627119670	0.6047043459948427	0.9956870985783488	T	T	T
0.7558857786068383	0.6041387721692216	0.9972292085845189	T	T	T
1.0015516461332683	0.8012311622330341	0.9971174424950829	T	T	T
0.2511874467926429	0.8013293818988256	0.9973768967921114	T	T	T
0.5006600701025681	0.8013418291227975	0.9972736605500593	T	T	T
0.7505507996002865	0.8007760743032523	0.9971846933628215	T	T	T
0.3344349459653170	0.3317654230582862	0.0569869421550636	T	T	T
0.4544307674021481	0.3744765879112040	0.1008091906116450	T	T	T
0.4745777848043688	0.3091980753321872	0.1259388254186262	T	T	T
0.4837489380650485	0.4557174778179588	0.1281764213938945	T	T	T
0.6099062417580088	0.4290431412059926	0.0634905131093480	T	T	T

```

FS: structure99
  structure99
    1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
  Cu    C    H
    60      2      3
  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
    0.1687754036631393    0.0685153085911757    0.9008392789398636    T    T    T
    0.4175312888826712    0.0673479746913839    0.9000866877696539    T    T    T
    0.6682067883215304    0.0676243581622670    0.9002299384082826    T    T    T
    0.9181504153507304    0.0671613763719233    0.9002422011948035    T    T    T
    0.1686830928110272    0.2673002124459044    0.9001635421878952    T    T    T
    0.4177389154117304    0.2674865856871793    0.8999202299976609    T    T    T
    0.6679264640969890    0.2674811775289190    0.8998169768989145    T    T    T
    0.9186337524174262    0.2675843123972712    0.9000255489176233    T    T    T
    0.1691584561579568    0.4660741137387420    0.9009621362671445    T    T    T
    0.4170580446428688    0.4664328112940272    0.8998691483036636    T    T    T
    0.6656261278605043    0.4666611389653407    0.9007588810204834    T    T    T
    0.9183675440020931    0.4676872213478400    0.8997658991522277    T    T    T
    0.1679417633665591    0.6672409459917404    0.8999697475025428    T    T    T
    0.4174569669251474    0.6667905059901333    0.9000316750999163    T    T    T
    0.6673774892273278    0.6668064102890235    0.8999189879604170    T    T    T
    0.9179889048404352    0.6672016095088682    0.8997703056879359    T    T    T
    0.1673531562117690    0.8669534324003224    0.9000319873123739    T    T    T
    0.4180586522216092    0.8673511607056831    0.9001675655801250    T    T    T
    0.6674547864453534    0.8672508528876607    0.9000594566106921    T    T    T
    0.9174478554536507    0.8666904737687432    0.8997913459783363    T    T    T
    0.0004251016125369    0.9988265703601095    0.9968222814662452    T    T    T
    0.2511615063075816    0.9989604774610885    0.9970127618189160    T    T    T
    0.5024938095676217    0.0006075644959246    0.9974398396102770    T    T    T
    0.7516221823230281    0.0005870758544688    0.9972796061119076    T    T    T
    0.0003707373404801    0.2001857567016266    0.9974594342112841    T    T    T
    0.2494444641843556    0.1963124332047430    0.0012185149538594    T    T    T
    0.5030849676687043    0.2002047127618985    0.9970596699448638    T    T    T
    0.7520872450632956    0.2012399567198545    0.9969666445381202    T    T    T
    0.0014936704393686    0.4014265085705745    0.9968503455548247    T    T    T
    0.2505475174408610    0.4021491757464494    0.0021073220237714    T    T    T
    0.5048781678099802    0.4019159876239156    0.0013726469306856    T    T    T
    0.7530127134962570    0.4013146271573614    0.9966597815615118    T    T    T

```

0.0021804661282589	0.6013895118084486	0.9973576125994859	T	T	T
0.2513509135985129	0.6015618824903669	0.9970540081622744	T	T	T
0.5028630530140682	0.6023666884762271	0.9968006219122869	T	T	T
0.7532600421103740	0.6015268701482819	0.9968136789781262	T	T	T
0.0014969594739128	0.8000695896339522	0.9974758362273811	T	T	T
0.2522516597218450	0.8009692717758636	0.9975714083334432	T	T	T
0.5022401285074812	0.8009642718531821	0.9973477549508357	T	T	T
0.7516889860994105	0.8005688333973294	0.9971606689687409	T	T	T
0.3330657793561781	0.3308983492210003	0.0575040675318912	T	T	T
0.3406972797123307	0.3327575725137235	0.1275427325454805	T	T	T
0.2819145418608435	0.2412739994620884	0.1474160351043647	T	T	T
0.2903699913075175	0.3830946370297212	0.1482735390956465	T	T	T
0.4582647675840003	0.3759500398304083	0.1437945063206493	T	T	T

HOCHCH_{3,ad} + H_{ad} = HOCH₂CH₃

IS: structure93 + 1/2H₂

TS: structure100

```

structure100
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

Cu C O H

60 2 2 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
0.1678935895892500	0.065913156553540	0.9007747379589633	T	T	T
0.4171524906947973	0.0658212357648235	0.9007321992009278	T	T	T
0.6672116709239010	0.0651937322479917	0.9002602968566887	T	T	T
0.9169751244376326	0.0649012398906348	0.9000100543225399	T	T	T
0.1669329249010054	0.2647585193711635	0.9001288638365883	T	T	T
0.4168627387214395	0.2650275482902820	0.8991094961219759	T	T	T
0.6658440596330379	0.2651852248383390	0.9007381593196453	T	T	T
0.9161053682090496	0.2650092624541061	0.8999750972041576	T	T	T
0.1656821296638023	0.4653164960249135	0.8994030948012984	T	T	T
0.4163100065200254	0.4643601085124034	0.8998899069528086	T	T	T
0.6641860912375457	0.4640943109077687	0.9009953375547298	T	T	T
0.9158046374178330	0.4651875840626598	0.8998753807532480	T	T	T
0.1664786743847089	0.6651019691516162	0.8999337120715325	T	T	T
0.4170593508048526	0.6656188970284526	0.8992719852111718	T	T	T
0.6675727551015314	0.6654069479637023	0.8996612304421067	T	T	T
0.9165617008496701	0.6647889261558586	0.9000799829975940	T	T	T
0.1674294668736764	0.8649760556735263	0.9000432896499686	T	T	T
0.4174937128159235	0.8654539650731560	0.9001690746190831	T	T	T
0.6672962348009108	0.8649276598902260	0.9002663785082560	T	T	T
0.9176444461794513	0.8650900979674891	0.9001409133442950	T	T	T
0.0006912162773131	0.9984550869049977	0.9972553034302339	T	T	T
0.2491894703724851	0.9963627157305930	0.9972937027904638	T	T	T
0.4999076056378554	0.9982342709377868	0.9975998347083590	T	T	T
0.7499110139608635	0.9979746591613403	0.9974078055448709	T	T	T
0.9991345550123851	0.1978724650269328	0.9966921389757747	T	T	T
0.2506358054240606	0.1987852433564707	0.9986992993631628	T	T	T
0.4994857373753672	0.1986114128742356	0.9990826062693620	T	T	T
0.7493909090094377	0.1980184763466367	0.9974669545189373	T	T	T
0.9998988355128176	0.3982009134554479	0.9971001506610561	T	T	T
0.2478187109702525	0.3999225374298400	0.9956033685645327	T	T	T
0.4994178393305901	0.3980083122962474	0.9997802638793412	T	T	T
0.7521381469685389	0.3987519719655492	0.9973396473934747	T	T	T
0.0010594998821998	0.5983069298298759	0.9973662508202158	T	T	T
0.2515127353606454	0.5990424393947124	0.9965442112363337	T	T	T
0.5015135559670273	0.5990840637758179	0.9957060256658057	T	T	T
0.7502034898190399	0.5978246039036996	0.9972329266320679	T	T	T
0.0000741691637404	0.7975546276249870	0.9973755755598968	T	T	T
0.2508691145871106	0.7977577353354819	0.9976715425153390	T	T	T
0.5006730853529040	0.7977533577917735	0.9977104982796203	T	T	T
0.7512077114879765	0.7983037130808059	0.9975824279880918	T	T	T
0.3595032632385097	0.3315479966905909	0.1456088902393742	T	T	T
0.3027216023447619	0.2063943555846087	0.1662895203832528	T	T	T
0.2672444880030523	0.3726418284385837	0.1480683332783627	T	T	T
0.3824785920285357	0.6006730579417926	0.1423514594008755	T	T	T
0.3176490736207203	0.4660749962918681	0.1425416937816612	T	T	T
0.3036409854021300	0.6210563569516724	0.1486764858601803	T	T	T

0.2868920334141922	0.2027486163701509	0.2178511900043589	T	T	T
0.3815863391303150	0.1753997788438371	0.1547313624243127	T	T	T
0.4203595393426374	0.6310874175801966	0.0992620157260434	T	T	T
0.4798425113156154	0.3957427030692646	0.1405609455172566	T	T	T
0.1922999440984762	0.1455900591081186	0.1453839573515733	T	T	T
0.3953475248211049	0.2828322850296079	0.0504396758132754	T	T	T

FS: structure101

```

structure101
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      O      H
60      2      2      8

```

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.1671574524216733	0.0675853272347542	0.89966990000006221	T	T	T
0.4174684089036218	0.0677745101199525	0.8998457391139203	T	T	T
0.6673457670650348	0.0677124400902914	0.8999424805602397	T	T	T
0.9177311661164959	0.0679016778792691	0.8998375637134759	T	T	T
0.1685182307492510	0.2694245856861184	0.9018545674596958	T	T	T
0.4175447982054794	0.2677073955800896	0.8998461125505883	T	T	T
0.6676758607324976	0.2679471515880551	0.9000404072002134	T	T	T
0.9174154838174357	0.2676905085053571	0.9000761983409152	T	T	T
0.1686522711226246	0.4665907662317872	0.9020034306092432	T	T	T
0.4153028783135231	0.4667694042597040	0.9018163194387036	T	T	T
0.6678453052095644	0.4679864243539468	0.8996580524772966	T	T	T
0.9178780232669302	0.4677893971349564	0.8998128913719191	T	T	T
0.1669928683810526	0.6673667571294539	0.8995057647014358	T	T	T
0.4174044117455953	0.6676761423918838	0.8994006839041530	T	T	T
0.6674364062858862	0.6674965212942824	0.8996690395589456	T	T	T
0.9174900030194169	0.6677276631428770	0.8998245497651007	T	T	T
0.1672001129508385	0.8675453160395680	0.8998092551426333	T	T	T
0.4171724500491775	0.8677391613842578	0.8997316871246207	T	T	T
0.6675549552279942	0.8677867290331830	0.8998012428819955	T	T	T
0.9170584337678674	0.8675709359878193	0.8999074842967120	T	T	T
0.0009988014506987	0.0015697526317514	0.9968230478331518	T	T	T
0.2512965165246733	0.0012937846262899	0.9969243811375488	T	T	T
0.5010849394429662	0.0017308061119890	0.9971029609634174	T	T	T
0.7507760239604052	0.0016315281213817	0.9970625215209129	T	T	T
-0.0008447551645293	0.2004675387320220	0.9968550668736378	T	T	T
0.2517755377044386	0.1998297419219189	0.9961807015758272	T	T	T
0.5017950555608991	0.2014705344027684	0.9970365233037802	T	T	T
0.7509691538444246	0.2016986388683938	0.9972717821201665	T	T	T
-0.0001019056563719	0.4018822771398449	0.9969564369063744	T	T	T
0.2524316842769579	0.4011947056366973	0.0055613057834994	T	T	T
0.5047632769950903	0.4019161838173952	0.9962280229945488	T	T	T
0.7521989807330658	0.4022253014462148	0.9972365436713883	T	T	T
0.0015446669584138	0.6022466676333879	0.9969701548227896	T	T	T
0.2517909917850016	0.6039019815787708	0.9960889386888162	T	T	T
0.5033939298408597	0.6043456104265429	0.9962421581169668	T	T	T
0.7516627250182890	0.6022538407366204	0.9970152971337315	T	T	T
0.0012033689272051	0.8019471902769949	0.9970071593635830	T	T	T
0.2511682787040799	0.8021665122576832	0.9970032813091301	T	T	T
0.5012167884082697	0.8024013116680826	0.9968372367147625	T	T	T
0.7513059821679119	0.8023675837095477	0.9971670566027667	T	T	T
0.3574988767576178	0.3750944378093177	0.1449835616350227	T	T	T
0.2696355798160600	0.2436947564843782	0.1628379437347658	T	T	T
0.2648882102743164	0.4078450864958781	0.1078925345620061	T	T	T
0.3391143633715026	0.6347805365585687	0.1436405164208832	T	T	T
0.2877551004515125	0.4899566850764498	0.1209265380131759	T	T	T
0.2530017214079442	0.6471583032241827	0.1463229326748996	T	T	T
0.1698725428929744	0.2236194826601228	0.19073085444456615	T	T	T
0.3408684043002538	0.2191458566975204	0.1903472998590487	T	T	T
0.3969844461673069	0.6845835358680470	0.1075934141185927	T	T	T
0.3956581048231321	0.4330209959556388	0.1869246699344985	T	T	T
0.2323209222589539	0.1860870382637555	0.1207077970120657	T	T	T
0.4584640719564169	0.3941814761924333	0.1173853724032360	T	T	T

CHCH_{2,ad} + H_{ad} = CH₂CH₂

IS: structure97 + 1/2H₂

TS: structure102


```

structure102
  1.000000000000000
    10.2813325984523996    0.000000000000000    0.000000000000000
    -6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.000000000000000
    0.000000000000000    0.000000000000000    21.2960046855129015
  Cu    C    H
  60    2    4
  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
0.1685112890321124 0.0695778282064688 0.9010397909288625 T T T
0.4179345549902855 0.067527959633744 0.8996061185793224 T T T
0.6680989958563882 0.0679394046445249 0.9001846958869905 T T T
0.9180920342449304 0.0686361452875980 0.9007118189481270 T T T
0.1670147117096373 0.2672671467194116 0.8994317421519692 T T T
0.4165760062092896 0.2684214061562564 0.9015467658111372 T T T
0.6671372481369029 0.2679279902474175 0.8997769341064261 T T T
0.9172088098561874 0.2673710611197578 0.9008224041718587 T T T
0.1661361629548684 0.4685624948860979 0.8987571406686216 T T T
0.4171012092056662 0.4662094582055862 0.9010572658611677 T T T
0.6632711262281250 0.4659493835229369 0.9021156516971705 T T T
0.9166046511103281 0.4678488588388097 0.8996292987397736 T T T
0.1665195205791170 0.6677533074276610 0.8996136349150283 T T T
0.4173316363219178 0.6677633933710084 0.8997386267399035 T T T
0.6670141290223401 0.6673562106886933 0.8997404521959971 T T T
0.9161414885932843 0.6671467023383181 0.8998095524254053 T T T
0.1666365697375167 0.8671404840013902 0.8993370760784400 T T T
0.41737772142485283 0.8676818704122227 0.8999109317212771 T T T
0.6677249500055367 0.8678901867204332 0.9001609393699819 T T T
0.9171236580240203 0.8674648284436013 0.8997135800100683 T T T
0.9989052237227960 0.9990020356845160 0.9968562486955881 T T T
0.2505628702944546 0.9984618551782805 0.9956020734462426 T T T
0.5010771776705647 0.0008187508816369 0.9972071151486945 T T T
0.7512400683148249 0.0018558294257403 0.9972247686056329 T T T
0.0024438969089052 0.2024013730113871 0.0006024152610024 T T T
0.2490165390186126 0.2002958887281995 0.0000106406259276 T T T
0.5028404031912879 0.1994887663404628 0.9955053049052183 T T T
0.7515889821618050 0.2011554545078514 0.9972336864891563 T T T
0.9992037185143421 0.4025770333986260 0.9972397898565764 T T T
0.2437383230954097 0.4052646186064149 0.9935559386651319 T T T
0.5048592714068211 0.4022765532876451 0.0053588372931885 T T T
0.7535459203608345 0.4015816625172849 0.9968310222167523 T T T
0.0006470074470647 0.6024188770393438 0.9969622156910943 T T T
0.2506137509537041 0.6036153574711741 0.9965648531370511 T T T
0.5015579598516178 0.6032757459060869 0.9960121879643400 T T T
0.7512750179702385 0.6026348675997917 0.9972606335058883 T T T
0.0004074680577728 0.8013619212517045 0.9969180769412745 T T T
0.2509796598885038 0.8015172225993104 0.9969924090124269 T T T
0.5013532388921756 0.8020437494201905 0.9972509974078413 T T T
0.7507485529843002 0.8017905163709470 0.9973501830118595 T T T
0.3651671325838884 0.2800784994301738 0.0783965315301749 T T T
0.4216683270355789 0.3921549645451046 0.1052545689631271 T T T
0.5034226539751221 0.4210698080717076 0.1435848847457198 T T T
0.3725449751156508 0.4495302572673532 0.0968552922112055 T T T
0.3960030241839897 0.2187744759550707 0.1014197218082936 T T T
0.1829046283075151 0.2407919476087823 0.0560546787519524 T T T

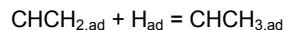
```

```

FS: structure103
  structure103
    1.000000000000000
      10.2813325984523996    0.000000000000000    0.000000000000000
      -6.4258328740327499    11.1298690187710640    0.000000000000000
      0.000000000000000    0.000000000000000    21.2960046855129015
    Cu    C    H
    60    2    4
    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

```

0.333333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.533333333333314	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.733333333333343	0.8029049805823973	F	F	F
0.083333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.333333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.583333333333357	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.833333333333286	0.933333333333300	0.8029049805823973	F	F	F
0.1669705223458464	0.0671076984185042	0.8996356202835657	T	T	T
0.4165844744751105	0.0670526002721976	0.8996268144128899	T	T	T
0.6668956898349104	0.0671671442832992	0.8998350811929372	T	T	T
0.9169799904760588	0.0672515111100701	0.8998818180688281	T	T	T
0.1670314970832243	0.2672671037172678	0.8997496069708981	T	T	T
0.4180419627777010	0.2692291181915415	0.9019501317100792	T	T	T
0.6667419635881424	0.2671752722284406	0.8997396941959765	T	T	T
0.9170550730494132	0.2674551849346669	0.8999161378143922	T	T	T
0.1671653449923137	0.4676346473265381	0.8995630039671630	T	T	T
0.4182173029139020	0.4659269518375558	0.9021086216421272	T	T	T
0.6639467952190522	0.4660129206972589	0.9018823971387619	T	T	T
0.9172868532183641	0.4676201631956949	0.8994826960821296	T	T	T
0.1668361321706965	0.6673422895905898	0.8997840036952885	T	T	T
0.4166853239929861	0.6669620491070039	0.8997091977357144	T	T	T
0.6667330017784504	0.6670993197406917	0.8997197392125470	T	T	T
0.9165047255898742	0.6669473246231907	0.8997289506436378	T	T	T
0.1666659139742314	0.8670569256183772	0.8998253094269109	T	T	T
0.4167486334999609	0.8671276282551345	0.8998081793134257	T	T	T
0.6668339668510723	0.8670977951501687	0.8999287033223610	T	T	T
0.9167666428183162	0.8670585571929278	0.8998676178837319	T	T	T
-0.0000279618653175	0.0007085361400226	0.9970291228830227	T	T	T
0.2500633336370520	0.0006962840557977	0.9967981533304511	T	T	T
0.5003211830443541	0.0006141767908962	0.9970212606717853	T	T	T
0.7501787980668662	0.0009372337554644	0.9970296626452375	T	T	T
0.9995426044601291	0.2006174579644736	0.9969849530897000	T	T	T
0.2474551196374243	0.1993261246126485	0.9962112387608256	T	T	T
0.5007333233947813	0.1991133716612965	0.9960678491288993	T	T	T
0.7505464624437036	0.2005378608701220	0.9969382111727155	T	T	T
0.0003889827355334	0.40131086330132686	0.9970737399178164	T	T	T
0.2465564909768016	0.4006609243904350	0.9960238937118304	T	T	T
0.4998737648644976	0.4001398138117187	0.0083942932085442	T	T	T
0.7537151021214270	0.4008708539052169	0.9957456628434324	T	T	T
0.0005625846705047	0.6014580067709651	0.9968687057610065	T	T	T
0.2503137676623916	0.6015152788379184	0.9968545824614505	T	T	T
0.5007200064892430	0.6027447945447770	0.9963220670207781	T	T	T
0.7517792215854419	0.6026948239617940	0.9963114378619365	T	T	T
0.0005481620536123	0.8013679869583907	0.9970610888251583	T	T	T
0.2504875807819660	0.8012582807685236	0.9970665498740036	T	T	T
0.5003193872548318	0.8013401285795049	0.9970331773097874	T	T	T
0.7506273133227669	0.8015762104553599	0.9970915987951225	T	T	T
0.4590774088975478	0.3308884048345949	0.1101674171630006	T	T	T
0.5398698382310929	0.4540215905633148	0.1114680154682425	T	T	T
0.6620533289420070	0.5020313545923877	0.1162397677783373	T	T	T
0.4843597466143854	0.5069004339963968	0.1177938758229681	T	T	T
0.5147885451657080	0.2776297339545687	0.1138363547449303	T	T	T
0.3370050882589533	0.2821791153814274	0.1154267287128018	T	T	T



IS: structure97 + 1/2H₂

TS: structure104

structure104		
1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu C H
60 2 4
Selective dynamics
Direct

0.083333333333357	0.133333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.333333333333286	0.133333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.583333333333357	0.133333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.833333333333284	0.133333333333329	0.8029049805823901	F	F	F
0.083333333333357	0.333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.333333333333285	0.333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.583333333333356	0.333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.833333333333286	0.333333333333356	0.8029049805823901	F	F	F
0.083333333333357	0.533333333333314	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
0.1681376484636336	0.0691866834981793	0.9007567217780739	T	T	T
0.4170548091393224	0.0667732881555086	0.8994217180491627	T	T	T

0.6673807726824825	0.0673830740530245	0.9002039506317624	T	T	T
0.9171631509626141	0.0669879693877126	0.9000729300347708	T	T	T
0.1669663632469345	0.2675033911146719	0.9004754630760569	T	T	T
0.4187239279157031	0.2690944706603181	0.9013980707335411	T	T	T
0.6679723471397077	0.2675252201011218	0.8999261491289642	T	T	T
0.9172927242243969	0.2677778824790246	0.9000457029456703	T	T	T
0.1690472799122525	0.4657622047766314	0.9014800832450832	T	T	T
0.4166892648294697	0.4665876116012368	0.9015531004944750	T	T	T
0.6640973128881076	0.4660026454127740	0.9009856048416425	T	T	T
0.9176582677539018	0.4681867245329330	0.8994239964968619	T	T	T
0.1666226973022234	0.6673950570737068	0.8995543718698823	T	T	T
0.4162992121357953	0.6674208106269431	0.8990976987015947	T	T	T
0.6677404882519240	0.6667562674527457	0.8996060957067861	T	T	T
0.9154109214211765	0.6663161349234996	0.9003668670010497	T	T	T
0.1666932304684002	0.8673702610895999	0.8996616763031134	T	T	T
0.4167121694837785	0.8668563013712940	0.8998446242629783	T	T	T
0.6673055456574755	0.8673492098022727	0.8999219617083526	T	T	T
0.9171836967674964	0.8669764802859212	0.8996532545237550	T	T	T
0.0011229945602206	0.0013689393251844	0.9968636273712864	T	T	T
0.2498634892029843	0.0000679674987314	0.9966951652518865	T	T	T
0.5001603361627026	0.9999671988782163	0.9972529712977719	T	T	T
0.7501888805724068	0.0003475505113246	0.9974255018157148	T	T	T
0.9958361154621107	0.1991832246722110	0.9963827849734148	T	T	T
0.2528895558856438	0.2010441220501434	0.9988298991366519	T	T	T
0.5022863829663731	0.1971892330430985	0.9959266929089395	T	T	T
0.7499797590204198	0.2000985081744013	0.9974292417727200	T	T	T
0.9998615697649644	0.4013841448111606	0.9965174163212668	T	T	T
0.2446299964763237	0.3999921405011624	0.0033277478177386	T	T	T
0.5066150494867957	0.3986674274438968	0.0032052308657546	T	T	T
0.7548285094719910	0.4006275529550937	0.9963387224243735	T	T	T
0.0019399999919510	0.6020110261642555	0.9966489777231831	T	T	T
0.2510231654399476	0.6027986881955508	0.9964921188712115	T	T	T
0.5024411032562277	0.6085722798139086	0.9938484983547375	T	T	T
0.7498542030008926	0.5997965959493040	0.9990843203106449	T	T	T
0.9996283098051695	0.8004928419015958	0.9969010243747863	T	T	T
0.2500477440673998	0.8016442402635194	0.9971525077770261	T	T	T
0.5007543398738575	0.8027607141081547	0.9972251052539303	T	T	T
0.7523516283702636	0.8025532672234218	0.9968493775196363	T	T	T
0.3306670083732902	0.3448301790674846	0.0690412235818301	T	T	T
0.4653770394494290	0.4284955979207075	0.1020013961692322	T	T	T
0.5088906743639772	0.3951611835651958	0.1393191599468678	T	T	T
0.4849303405567711	0.5191054083619127	0.1108359138953184	T	T	T
0.2786219867256230	0.2537599739637588	0.0907402355110198	T	T	T
0.6131484920380275	0.4923537451016703	0.0589972697276160	T	T	T

FS: structure105
 structure105
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu	C	H
60	2	4

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
0.1685340041855362	0.0698799876471070	0.9011869853918842	T	T	T
0.4173036493142638	0.0677659760161080	0.9000066703962604	T	T	T
0.6680763563511947	0.0681547884650650	0.9002077292318662	T	T	T
0.9179056818470741	0.0680827005441080	0.9000691906120767	T	T	T
0.1685318291167296	0.2686362238895139	0.9013017040851897	T	T	T
0.4171493852844799	0.2677651864500117	0.8999280159576555	T	T	T
0.6672650917734482	0.2680928959822365	0.9000156122183004	T	T	T
0.9174572941748618	0.2686254269662944	0.8997469470929408	T	T	T
0.1690189065329388	0.4669544501229440	0.9014512812300203	T	T	T
0.4169283818580884	0.4677005117414471	0.9004707988373796	T	T	T
0.6633748130665038	0.4664176510278473	0.9013924905100064	T	T	T
0.9172220957227534	0.4683327365981779	0.8997973817281361	T	T	T
0.1664203742732461	0.6676801111386010	0.8999187579464640	T	T	T
0.4166781687892394	0.6676348390620723	0.8997557904606263	T	T	T
0.6671866442313568	0.6676590133247341	0.8997645487456774	T	T	T
0.9170632038970814	0.6677465294378579	0.8997491612144322	T	T	T
0.1668855168463034	0.8681505446812998	0.8999001838569292	T	T	T
0.4169633570863512	0.8675359076671044	0.8999645064179885	T	T	T
0.6674952335097880	0.8680569576032454	0.9001148042247895	T	T	T
0.9171340592311842	0.8675978527092268	0.8997720844713072	T	T	T

0.0008639919706533	0.0022110959196518	0.9968422411490157	T	T	T
0.2505128375981819	0.0002894230329495	0.9973138704037841	T	T	T
0.5010917634128041	0.0017335458718332	0.9972315916146665	T	T	T
0.7509144206211836	0.0019436549222298	0.9975052840276613	T	T	T
0.9971681976432791	0.2019010520587652	0.9958165172659712	T	T	T
0.2547976516070477	0.1989707810812666	0.0004758669811281	T	T	T
0.5029064654181653	0.2007184683666366	0.9970510123128197	T	T	T
0.7510370951727086	0.2024311996672666	0.9972845446215934	T	T	T
0.0009407077547090	0.4029745593866246	0.9970172320096435	T	T	T
0.2529426969010698	0.4080413473003831	0.0035082691935777	T	T	T
0.4978367904010140	0.3981355034005757	0.0010035159418470	T	T	T
0.7513402463135731	0.4027247383094179	0.9969242425150279	T	T	T
0.0003554202920895	0.6027453898302431	0.9973723483760529	T	T	T
0.2509668740476513	0.6047492880346411	0.9971091319787988	T	T	T
0.5036316201627771	0.6069760926905312	0.9960298333872969	T	T	T
0.7504216370636473	0.6021615620510165	0.9966245433019849	T	T	T
0.0002000130358203	0.8017538125899035	0.9971899726374339	T	T	T
0.2501770725287142	0.8025385664569653	0.9973255351236596	T	T	T
0.5013404750899898	0.8034736756729771	0.9972801060247152	T	T	T
0.7520803080460072	0.8031937471472953	0.9973791201485561	T	T	T
0.3330085665847774	0.3395418507089005	0.0672383323133372	T	T	T
0.4184486545753749	0.3943197944620768	0.1278466976313311	T	T	T
0.4348178224365121	0.3282676300803398	0.1545804723302591	T	T	T
0.3538580410441927	0.4220461222862230	0.1581783254038257	T	T	T
0.2281949599917852	0.2544767422785285	0.0814459114236755	T	T	T
0.5294376753843720	0.4743944519883225	0.1203285134500810	T	T	T



IS: structure105 + 1/2H₂

TS: structure106

structure106		
1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015
Cu	C	H
60	2	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
0.1686826832827069	0.0685591774177437	0.9003785422113751	T	T	T
0.4182956831080649	0.0678305462487895	0.9000023986366062	T	T	T
0.6689305049441963	0.0683642837950072	0.9002207043548640	T	T	T
0.9192003857525012	0.0692851425912955	0.9008161295984115	T	T	T
0.1682258908211843	0.2678628236994270	0.9003204326847449	T	T	T
0.4182073970952831	0.2682071072490806	0.8996492261625615	T	T	T
0.6683301497246965	0.2686306392777906	0.8998911472481316	T	T	T
0.9184779227051953	0.2686359386076640	0.9001612035949509	T	T	T
0.1689021111113463	0.4668314490683009	0.9013485034542894	T	T	T
0.4155298362587324	0.4670945677452736	0.9012637649683750	T	T	T
0.6625729731830095	0.4665934343071759	0.9016942216496208	T	T	T
0.9171347042772828	0.4680539018971956	0.9001895491407992	T	T	T
0.1667626009065187	0.6676998675285392	0.8996743349631411	T	T	T
0.4175277658777603	0.6684021712568895	0.8995134423498437	T	T	T
0.6677077012002106	0.6678319451618747	0.8995789151131048	T	T	T
0.9169340087182504	0.6673941574308417	0.8997910761914858	T	T	T
0.1675003635751426	0.8675720979219983	0.8996820510540030	T	T	T
0.4178793001990043	0.8677179043534591	0.9001240361612362	T	T	T
0.6684187257701490	0.8682572905006966	0.9000896851107215	T	T	T
0.9177711277062932	0.8677189286098337	0.8997630481978155	T	T	T
0.0021466584570854	0.0016780565417447	0.9967401173209692	T	T	T
0.2521071276030726	0.9989760012252420	0.9969775713488961	T	T	T
0.5029757256167833	0.0015519931934853	0.9973527105865159	T	T	T
0.7532939256054624	0.0026916170331389	0.9976417541084605	T	T	T
0.0014129613661037	0.2037923452873563	0.9988281632619485	T	T	T
0.2564383781704527	0.1955924964760808	0.9965172493671227	T	T	T
0.5059668477770823	0.2007959134591760	0.9965145729194163	T	T	T
0.7524453645928001	0.2022652920202737	0.9970215286703974	T	T	T
0.9998848461435446	0.4033382070283048	0.9975812448638733	T	T	T
0.2512135949311817	0.4051355529636573	0.0024569913622448	T	T	T
0.4956875199516696	0.3983068015362505	0.0031330314673836	T	T	T
0.7499698763333167	0.4025937556940810	0.9971279018601547	T	T	T
0.0008625118127349	0.6026316112026022	0.9971044273270868	T	T	T

0.2524916292866377	0.6053533715011727	0.9963957884667183	T	T	T
0.5037428285391368	0.6067918474140604	0.9953250314688196	T	T	T
0.7501526345327031	0.6022270667221911	0.9968236181459735	T	T	T
0.0011692400676841	0.8015353810944852	0.9971107352178917	T	T	T
0.2513631241393029	0.8021059188072144	0.9972413208119488	T	T	T
0.5030518867039322	0.8037710005339320	0.9974684572989705	T	T	T
0.7529278451417156	0.8031204394772252	0.9973154312922144	T	T	T
0.3262731509129115	0.3375582568189340	0.0703765289105013	T	T	T
0.3912715745098365	0.4070709213126471	0.1309044919979995	T	T	T
0.4617551002448319	0.3754193186760786	0.1536064706146438	T	T	T
0.3018124761918444	0.3912403082982434	0.1647378481520352	T	T	T
0.2570299686493465	0.2410222139899805	0.0846156445092909	T	T	T
0.4607774300319910	0.5043408273347968	0.1233516114628908	T	T	T
0.1378384398052957	0.3176948054580133	0.0547163057214825	T	T	T

FS: structure107

```

structure107
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

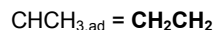
Cu C H

60 2 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
0.1685511389509214	0.0692736851660429	0.9010881425878337	T	T	T
0.4169819134695454	0.0667552148729352	0.8997009865117100	T	T	T
0.6675355486531546	0.0673910521702179	0.9002198884691219	T	T	T
0.9171148870193370	0.0668532395033629	0.8996023093147608	T	T	T
0.1674472401985048	0.2676244078919351	0.9004969076958504	T	T	T
0.4170079756189628	0.2674082266528874	0.9002180811236024	T	T	T
0.6674086280546644	0.2677398795774164	0.8996895248065185	T	T	T
0.9164215462248981	0.2677743891528487	0.8996210287082079	T	T	T
0.1684185991104231	0.46662060667605319	0.9011607825167537	T	T	T
0.4170765695535774	0.4675364212027632	0.9003329674383435	T	T	T
0.6623219415813616	0.4657030030931489	0.9019884244880374	T	T	T
0.9166940983341170	0.4676641644510302	0.8996054546084896	T	T	T
0.1663535453155406	0.6669397303075923	0.8998931065175660	T	T	T
0.4168927209055238	0.667778265640408	0.8996985198249934	T	T	T
0.6673555126891261	0.6675541202781778	0.8995872311994445	T	T	T
0.9163543770981644	0.6668369362542856	0.8998159393433031	T	T	T
0.1667980439937908	0.8672090274219508	0.8997656926429797	T	T	T
0.4168801914528786	0.8670074461431578	0.8999832378312437	T	T	T
0.6672096079687455	0.8671852009779192	0.9000091795257060	T	T	T
0.9173647795801713	0.8671439999873526	0.8996856970722166	T	T	T
0.0008974910953384	0.0016509851206158	0.9966221025924665	T	T	T
0.2508777629269209	0.0004989477643222	0.9968992132127585	T	T	T
0.5008835593543480	0.0007349942670402	0.9972962931211371	T	T	T
0.7506028097576307	0.0011249602522892	0.9973432976341476	T	T	T
0.9975511975667311	0.2005281646684996	0.9952801699630550	T	T	T
0.2524357219240339	0.2008657502852302	0.9994726501245317	T	T	T
0.5031373689380028	0.1994074055223746	0.9955463857936998	T	T	T
0.7512169582317565	0.2016584837699091	0.9972344704175607	T	T	T
0.0001703460245204	0.4016656208716121	0.9966531439633984	T	T	T
0.25180774930824920	0.4035070201294728	0.9995849000324099	T	T	T
0.4939687525956390	0.3986973284792223	0.0024085660622100	T	T	T
0.7502079559108821	0.4012914607084853	0.9965331449033429	T	T	T
0.0001395681011321	0.6015513981839187	0.9970239625119528	T	T	T
0.2511690442116248	0.6028147963878919	0.9970848321850949	T	T	T
0.5033215900960506	0.6057094730036862	0.9957091280417796	T	T	T
0.7498196723553709	0.6017686326290084	0.9967985265084577	T	T	T
0.0005025754047280	0.8011752407339717	0.9969393561163680	T	T	T
0.2500910902757413	0.8013721321357593	0.9972051952007501	T	T	T
0.5010498674509113	0.8024691679003009	0.9972716534508330	T	T	T
0.7520775698748083	0.8025321942938289	0.9971419330305322	T	T	T
0.3386476339728328	0.3325318279994283	0.0830066633310858	T	T	T
0.4690534146166696	0.3799338112981405	0.1302341342527631	T	T	T
0.5347473955651987	0.3341124609231975	0.1254680798432491	T	T	T
0.4245297357354481	0.3645530759645534	0.1786332914892116	T	T	T
0.2616278853963100	0.2352632336444427	0.0930939081369545	T	T	T
0.5471766354601809	0.4769701637949338	0.1250379730178478	T	T	T
0.2683981134878607	0.3738093577043716	0.0940780201639433	T	T	T

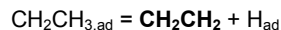


```

IS: structure105
TS: structure108
structure108
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      H
60      2      4
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
0.1661954499702987      0.0670558747042687      0.8996916039887947      T      T      T
0.4157523109214494      0.0671662165012193      0.8998303854333305      T      T      T
0.6661972070898037      0.0674802135571425      0.9000257288540133      T      T      T
0.9161555183389120      0.0672846338962891      0.900019705304326      T      T      T
0.1662108457324194      0.2675246721057112      0.8998503624445408      T      T      T
0.4167422880484984      0.2692378765675635      0.901541541292343      T      T      T
0.6656539468505182      0.2674489563305245      0.8998015028022189      T      T      T
0.9157684629548359      0.2674776088307035      0.9000421164459755      T      T      T
0.1657678748696720      0.4678171735187667      0.8995605268576800      T      T      T
0.4169252944850880      0.4663993566233507      0.9017439486252264      T      T      T
0.6626513696499531      0.4661970334397783      0.9017474856611608      T      T      T
0.9159980559057799      0.4676721979408122      0.8995808854773405      T      T      T
0.1658552520832574      0.6674924785174386      0.8999347275115555      T      T      T
0.4157746716068378      0.6671631564474381      0.8999086203192934      T      T      T
0.6658216473271196      0.6672372977142119      0.8999948885326237      T      T      T
0.9156240097450417      0.6670186166704438      0.8999143056244037      T      T      T
0.1659086082227904      0.8671051868559335      0.9000173148758304      T      T      T
0.4162192773530328      0.8674627940176757      0.9000227676206121      T      T      T
0.6661169093650096      0.8672360638917418      0.9000742103132707      T      T      T
0.9161695019445891      0.8672125373246931      0.9000876582185885      T      T      T
0.9983543924814635      0.0010433596590119      0.9973450162656760      T      T      T
0.2486929308739175      0.0012740890948599      0.9971994955930351      T      T      T
0.4987960529970537      0.0013986640901832      0.9974782013156918      T      T      T
0.7486146325417332      0.0016212285050433      0.9972795926551483      T      T      T
0.9983353753563953      0.2013026187530971      0.9971431565067564      T      T      T
0.2453139760070985      0.1988096232826012      0.9962258303114435      T      T      T
0.4993290492873890      0.1999351554912953      0.9964848480995480      T      T      T
0.7488714364762039      0.2012738619163073      0.9972308547362082      T      T      T
0.9986298543529682      0.4018171155535901      0.9973792622293226      T      T      T
0.2446128465079399      0.4014313819852126      0.9958489712382635      T      T      T
0.4985009798501088      0.4021933364208419      0.0063809583992158      T      T      T
0.7521128898335010      0.4013458494753640      0.9960006464000379      T      T      T
0.9984520208483600      0.6017057070824260      0.9973029298331066      T      T      T
0.2484192867506731      0.6021498117874076      0.9970450766310917      T      T      T
0.4989198973842693      0.6036411959611968      0.9969274559045388      T      T      T
0.7508741684555779      0.6038356994942620      0.9967130111022526      T      T      T
0.9989398482160493      0.8018650213448909      0.9974864409329562      T      T      T
0.2488071570463531      0.8017286966997950      0.9973147814698317      T      T      T
0.4987457180658680      0.8020935976649520      0.9973313561337438      T      T      T
0.7490135646370497      0.8022521942491769      0.9974528908632408      T      T      T
0.4802721326040632      0.4007224195950126      0.0983698325622672      T      T      T
0.5837573379043646      0.4188787906565039      0.1461481124672531      T      T      T
0.6960955171941080      0.4348598522973269      0.1344289044698202      T      T      T
0.5582515139397016      0.4202614497963519      0.1960563797400292      T      T      T
0.5029807055903515      0.3151641608342101      0.1123155087102769      T      T      T
0.3710254305770918      0.3807203315195309      0.1177705968440212      T      T      T

```

FS: structure103



IS: structure107

TS: structure109

```

structure109
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015
Cu      C      H
60      2      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
0.1674737007528809 0.0681194859475217 0.9001155149830546 T T T
0.4164057859812347 0.0665010840295193 0.8992372170786682 T T T
0.6669946291550917 0.0675547755565080 0.9000482001200145 T T T
0.9166685960278853 0.0670220087837296 0.8999384718488528 T T T
0.1663244335098106 0.2674382918655022 0.8998976345473855 T T T
0.4177675471704467 0.2689028636054008 0.9017308413807358 T T T
0.6671912846842264 0.2681834135820930 0.9000731019444732 T T T
0.9165552175421706 0.2678049923891863 0.8999337708226653 T T T
0.1675509720674630 0.4670726077112441 0.9001953463496823 T T T
0.4179980805280637 0.4666220510495468 0.9019310558997536 T T T
0.6623928235216832 0.4657768004179162 0.9013105973724915 T T T
0.9154994441037168 0.4675842477969556 0.8999484327087571 T T T
0.1663822683766653 0.6672853446085054 0.8996990967822459 T T T
0.4164203377115715 0.6677600847688939 0.8993544435051082 T T T
0.6667976157914781 0.6668944016689178 0.8999540115764597 T T T
0.9154436650167749 0.6664100880401591 0.8999504432892915 T T T
0.1663325308998955 0.8670335878181482 0.8997441055807019 T T T
0.4165986730251057 0.8671228316422529 0.8998958228787123 T T T
0.6669073423191320 0.8672649013715893 0.9000559740095760 T T T
0.9167248932402793 0.8671310141478004 0.8997708600893136 T T T
0.0000874408469085 0.0014149636398099 0.9970337244843546 T T T
0.2493042054985519 0.0003710777523997 0.9967960185892236 T T T
0.5004144318756552 0.0003063816786426 0.9972127157269157 T T T
0.7503262930575875 0.0012166047320474 0.9974052885615613 T T T
0.9980668563641628 0.2006653766842183 0.9964351565488974 T T T
0.2481987842938698 0.1995665359955295 0.9971961672014747 T T T
0.5002277295004820 0.1959952580932702 0.9950263424285037 T T T
0.7502854107864043 0.2015104717909015 0.9972759976775698 T T T
0.9995733477985007 0.4016241716775422 0.9967953311320759 T T T
0.2487940069296097 0.4018675127043508 0.9974583416075152 T T T
0.4947378946931728 0.3990748671342718 0.0080500530897542 T T T
0.7503599003069755 0.4021859249081456 0.9978101437287937 T T T
0.0015443012753001 0.6022883225959839 0.9969104581084108 T T T
0.2500950674547877 0.6021309635208012 0.9968920056490290 T T T
0.5004839262139837 0.6064021058316700 0.9954150737419595 T T T
0.7506809323154666 0.6017695446550284 0.9974345579638766 T T T
0.9998197046506461 0.8009729662073451 0.9970392713111050 T T T
0.2499774003326549 0.8016375097162798 0.9972133546498939 T T T
0.5000377478115127 0.8024333422553699 0.9972236429612855 T T T
0.7511709282320270 0.8018789044817443 0.9971558502627819 T T T
0.3741002850935532 0.3492588568923831 0.0961324794313843 T T T
0.5314509808678343 0.4059886984518949 0.1106071486685030 T T T
0.5739071855822730 0.3486230999726885 0.1280756793827112 T T T
0.5844479051514266 0.4957401810594786 0.1313264856157426 T T T
0.3057552380045351 0.2522725198214577 0.1040390234712225 T T T
0.6477779504604917 0.4521421002035512 0.0551222781582957 T T T
0.3157670620529942 0.3989508093599066 0.1063206081772335 T T T

```

```

FS: structurel10
    structurel10
        1.000000000000000
        10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
        -6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000
        0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
        Cu C H
        60 2 5
Selective dynamics
Direct

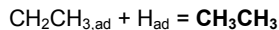
```

```

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
0.1669859673075035	0.0671039938901542	0.8996667028641512	T	T	T
0.4170018205714576	0.0676189463413204	0.8997121739177999	T	T	T
0.6668867183185301	0.0671145219936576	0.9000046284795685	T	T	T
0.9165716270523847	0.0670754239189566	0.8999942818753526	T	T	T
0.1660651283384848	0.2670064080583984	0.8997193638385454	T	T	T
0.4184059811598678	0.2699308479296047	0.9022090358370277	T	T	T
0.6676146198683065	0.2673105960302726	0.8997481656941960	T	T	T
0.9169396031879632	0.2674531719305060	0.8999913797959815	T	T	T
0.1668412746210684	0.4675479720704150	0.8996950245319010	T	T	T
0.4172280372511161	0.4657799595363570	0.9016502831884510	T	T	T
0.6645250893650512	0.4658199623212707	0.9016548202103946	T	T	T
0.9171802141534265	0.4675199316091494	0.8996488338713601	T	T	T
0.1669027479072579	0.6675248635358532	0.8995492143988064	T	T	T
0.4175921055949396	0.6662504517004705	0.9003678108802505	T	T	T
0.6672561385498686	0.6679231906080957	0.8989614997265355	T	T	T
0.9144276660518166	0.6661391003767574	0.9004655096110965	T	T	T
0.1669983259391465	0.8672389349277797	0.8996535562500541	T	T	T
0.4166212277103857	0.8672606499966150	0.8998300623851822	T	T	T
0.6666267418645959	0.8673467992015459	0.8999972564369878	T	T	T
0.9171917566125286	0.8671992405329467	0.8997999669854383	T	T	T
0.000552953382776	0.0011535367568303	0.9971513424725577	T	T	T
0.2505173181039270	0.0010758655405467	0.9968104688492904	T	T	T
0.4999569053669506	0.0008422413241881	0.9973436365655265	T	T	T
0.7499230059592231	0.0011621199311970	0.9974531293351688	T	T	T
0.9990378311895065	0.2002375034606414	0.9970554877071872	T	T	T
0.2474067348111295	0.1997445581000182	0.9961028347520510	T	T	T
0.5014798905889092	0.1997004473134244	0.9962304642948516	T	T	T
0.7505127976850454	0.2003561381294741	0.9971147407130001	T	T	T
0.0002903563917994	0.4011532956609917	0.9967511360557252	T	T	T
0.2471449448619315	0.4001889248726310	0.9960995280276123	T	T	T
0.4977753901498415	0.3972869469824304	0.0128863105047902	T	T	T
0.7522245876883841	0.4003176222330951	0.9962096219035539	T	T	T
0.0004993597843102	0.6015381216138659	0.9964759771030556	T	T	T
0.2502487981109657	0.6014956698689362	0.9964290436615635	T	T	T
0.4992404012484296	0.6021992741775742	0.9979622463910797	T	T	T
0.7526588227783194	0.6023614389710362	0.9982997772380902	T	T	T
0.0011387169567477	0.8018897052731190	0.9967782517249636	T	T	T
0.2504745587290407	0.8015281617654114	0.9971500183251905	T	T	T
0.5000932169567884	0.8017428399926158	0.9969244732532410	T	T	T
0.7518751783994704	0.8035638804953026	0.9963492686796942	T	T	T
0.3986254156779298	0.3455645990245321	0.1194474989010660	T	T	T
0.5329610389475911	0.3486817254643680	0.1198931845041798	T	T	T
0.5385011155822661	0.2659429557385439	0.1183145050217850	T	T	T
0.6384579473606539	0.4315993963002220	0.1288089042147772	T	T	T
0.2928542260131396	0.2602002897662570	0.1176424747006229	T	T	T
0.5939015315214240	0.5508920106933576	0.0402545677034399	T	T	T
0.3905763687960734	0.4259112663524559	0.1279293007414962	T	T	T



IS: structure107 + 1/2H₂

TS: structure111

structure111		
1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu	C	H
60	2	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
0.3333333333333285	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
0.1671416155573180	0.0678516107595779	0.8998544969900590	T	T	T
0.4172045768609294	0.0677804003394886	0.8998883168356240	T	T	T
0.6669484698145731	0.0677117498323849	0.8998481394555661	T	T	T
0.9174653444320225	0.0678144754419348	0.8999045975801486	T	T	T
0.1676835537105932	0.2689863723431386	0.8998266462493969	T	T	T
0.4163281207240739	0.2677515379342169	0.9001422321144926	T	T	T
0.6670788071434428	0.2677882224311288	0.8997527279385339	T	T	T
0.9179198711468982	0.2676883430454748	0.9001219203075629	T	T	T

0.1682487670204000	0.4664374988227538	0.9015088507669556	T	T	T
0.4141022605505465	0.4663319086918642	0.9017880346094344	T	T	T
0.6674852042286989	0.4679713042801828	0.8994032623738590	T	T	T
0.9174009258817710	0.4681109452750704	0.899406752256795	T	T	T
0.1671538564441977	0.6676931933764845	0.8995734740883016	T	T	T
0.4175066015604227	0.6678754538782365	0.8994446142493854	T	T	T
0.6670905989918343	0.6675113643510577	0.8995922821533167	T	T	T
0.9172646615819662	0.6678622944701269	0.8997328780629297	T	T	T
0.1671154922864718	0.8678703785142811	0.8998891381701066	T	T	T
0.4171212402942779	0.8676693860380179	0.8999503191588398	T	T	T
0.6673158973783513	0.8677520561515674	0.8998293160634553	T	T	T
0.9172306332955570	0.8676911090998489	0.8997640208993944	T	T	T
0.9998373369198782	0.0005635455869581	0.9970079239328217	T	T	T
0.2506680260254991	0.0020666730776887	0.9969988327587459	T	T	T
0.5006109433390354	0.0020883744370148	0.9970617050925268	T	T	T
0.7507385686231064	0.0020578488480346	0.9968637997884047	T	T	T
0.0001755668164532	0.2002596051553645	0.9973433558781158	T	T	T
0.249523910590598	0.2005965109233595	0.9970903170333095	T	T	T
0.5007420847448019	0.2017131620381321	0.9964635942990610	T	T	T
0.7509283901119579	0.2017691175968969	0.9965185164227939	T	T	T
0.9969937909747475	0.4027775360314714	0.9958168957417912	T	T	T
0.2515527722008945	0.4042904399768412	0.0067824422342432	T	T	T
0.5059073655326334	0.4033187403379811	0.9958510593134250	T	T	T
0.7511126704921520	0.4023365288275687	0.9967756978801846	T	T	T
0.0013904313053375	0.6030280686551006	0.9967297799958191	T	T	T
0.2522449815161428	0.6044094971555418	0.9957660610936097	T	T	T
0.5027140961674739	0.6042003265404694	0.9961556726704127	T	T	T
0.7518186650384354	0.6028764341752066	0.9967580408160226	T	T	T
0.0012225165039357	0.8022941188864725	0.99709972072739436	T	T	T
0.2511537185892446	0.8026386082201277	0.9971684234207537	T	T	T
0.5014712523456477	0.8029832106569951	0.9970547436335875	T	T	T
0.7508874892594931	0.8023535661104798	0.9969249516841369	T	T	T
0.2334728569523128	0.3906626967350972	0.1086789070542438	T	T	T
0.3612385151978830	0.3855754384455093	0.1407134682438171	T	T	T
0.3551757322938546	0.2981528787895936	0.1345824532674218	T	T	T
0.3578652257827461	0.3998976467672680	0.1918061049718775	T	T	T
0.1223272871639526	0.3250374822592283	0.1267696557031979	T	T	T
0.4716227266999292	0.4556672129969841	0.1234128040822640	T	T	T
0.2444848056473235	0.4802577519826935	0.1095749647815693	T	T	T
0.1748148014038533	0.2791172143534659	0.0459119761909784	T	T	T

FS: structure112
 structure112
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C H
 60 2 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
0.1674238504736704	0.0677453949123563	0.9001390330933656	T	T	T
0.4174712280168307	0.0678202641408544	0.9001333543058034	T	T	T
0.6674786880200853	0.0678335334779712	0.9001455239469597	T	T	T
0.9174157464448716	0.0677798589902018	0.9001360646913411	T	T	T
0.1672610820277181	0.2678253998470195	0.9001035782445813	T	T	T
0.4173208580711564	0.2678197782762593	0.9001042088638721	T	T	T
0.6673011172017560	0.2678442968545887	0.9001262155557082	T	T	T
0.9172932499719728	0.2678525855045869	0.9001235221626860	T	T	T
0.1671068990845069	0.4678791002886508	0.9001053752564372	T	T	T
0.4171601801190266	0.4678546545766946	0.9000916051366682	T	T	T
0.6672810741451869	0.4678801874457513	0.9000792020593554	T	T	T
0.9171784752706977	0.4678692650716706	0.9001175590267094	T	T	T
0.1671505765542904	0.6678642146931213	0.9001445652167304	T	T	T
0.4171501412889807	0.6678702670322095	0.9001444196964477	T	T	T
0.6671593763040096	0.6678435400997019	0.9001388752935757	T	T	T
0.9171869023484891	0.6678582482147838	0.9001378754914067	T	T	T
0.1673819276209965	0.8678357446425212	0.9001432653933367	T	T	T
0.4174053338069534	0.8678533127096588	0.9001396800740958	T	T	T
0.6673508957182123	0.8678243071227096	0.9001525468622816	T	T	T
0.9173481717555145	0.8677936593498388	0.9001370206638641	T	T	T
0.0012503356974864	0.0021757346723449	0.9973305445776152	T	T	T
0.2513374911515165	0.0022145973392152	0.9973539041103060	T	T	T
0.5013224336665917	0.0022443722936880	0.9973619114114544	T	T	T
0.7512429565613152	0.0022070503400002	0.9973549086857096	T	T	T

0.0007570004065937	0.2021655706815801	0.9972327838701468	T	T	T
0.2508949682582812	0.2021570936635328	0.9971924856862867	T	T	T
0.5010463210239630	0.2022098084623722	0.9972648450550055	T	T	T
0.7509214705700882	0.2022299684650873	0.9973295205325882	T	T	T
0.0006749503577847	0.4022504032319658	0.9973050185169327	T	T	T
0.2506495669633669	0.4022950775525892	0.9971635592728576	T	T	T
0.5009747705857991	0.4023498717744228	0.9970995386277075	T	T	T
0.7507621330105573	0.4022387535875410	0.9973126887775150	T	T	T
0.0009379957901629	0.6022518264497927	0.9973336395609532	T	T	T
0.2508834408053870	0.6022611563361483	0.9973376294387002	T	T	T
0.5009700259697139	0.6023105780887291	0.9972846559003753	T	T	T
0.7510026724719397	0.6022929733084476	0.9973186894278029	T	T	T
0.0013143160643452	0.8022637946015087	0.9973612710137721	T	T	T
0.2512935059227374	0.8022517358328108	0.9973745389018178	T	T	T
0.5012704601448731	0.8022569992005971	0.9973752750564705	T	T	T
0.7512756331538267	0.8022476210095439	0.9973700185580632	T	T	T
0.3011547073791039	0.3142076327127393	0.1756690587012703	T	T	T
0.4695011895704549	0.3776961824865541	0.1888729196383032	T	T	T
0.5199593900492125	0.3256299863847567	0.1708691313397983	T	T	T
0.4928980224897219	0.3908455106520874	0.2395689030731099	T	T	T
0.2414528670468059	0.2248170416608918	0.1976192774339459	T	T	T
0.5284747649109995	0.4667803702981052	0.1664588282064589	T	T	T
0.2499753648884979	0.3659904300876013	0.1932431629581145	T	T	T
0.2778824819030968	0.3011940293380103	0.1248298644161230	T	T	T

A3. Coordinates for all pathways in Table S3

HCHO + H_{ad} = CH₃O_{ad}

IS: structure113 + 1/2H₂

structure113			
1.0000000000000000			
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
-5.1406662992261998	8.9038952150168509	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015	

Cu C O H
48 1 5 10

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	0.41666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.41666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.41666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.41666666666666714	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	0.91666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.3333333333333286	0.91666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.5833333333333357	0.91666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.8333333333333286	0.91666666666666714	0.8029049805823973	F	F	F
0.1674822055322101	0.0840032769051596	0.8996949785645495	T	T	T
0.4171021937722295	0.0830853433449409	0.8989003604281370	T	T	T
0.6676553720090609	0.0851369714271825	0.9003052420526232	T	T	T
0.9170939191873677	0.0837337525389220	0.8992610958021094	T	T	T
0.1668666204377811	0.3337634245074644	0.8992015509686473	T	T	T
0.4166010862624595	0.3341066578246759	0.8989910469118622	T	T	T
0.6680911914599061	0.3337175109073963	0.9002363988293981	T	T	T
0.9169536375792888	0.3352420973286532	0.9025747952504086	T	T	T
0.1656447199135924	0.5828502090136037	0.9010513826273464	T	T	T
0.417779309412383	0.5859956982949241	0.9008451425873822	T	T	T
0.6675010125207852	0.5843227086106071	0.8989124096699284	T	T	T
0.9188047598455756	0.5836605751949289	0.9006124518929683	T	T	T
0.1676799113710144	0.8343824832499476	0.8991214956790654	T	T	T
0.4189706867957574	0.8329934066058441	0.9006386376738221	T	T	T
0.6653068925782585	0.8327387929547304	0.9010531182831932	T	T	T
0.9170355208544924	0.8342369753543639	0.8992160652355717	T	T	T
0.0015770731942326	0.0009899630281468	0.9968450366427491	T	T	T
0.2515660159711294	0.0022987143240455	0.9971283310833442	T	T	T
0.4990180471770017	0.0015422369709659	0.9958014791185714	T	T	T
0.7532211847803008	0.0022151574005224	0.9956845594881545	T	T	T
0.0020751972865294	0.2490128567904071	0.9961636799951936	T	T	T
0.2504634179235157	0.2507127929356988	0.9975366048603952	T	T	T
0.4990772381972731	0.2505022665247509	0.9947799518438527	T	T	T
0.7483329255921302	0.2489857654510509	0.0001772007288420	T	T	T
0.0029120293614403	0.5033734993733269	0.0021269932981821	T	T	T
0.2506715267778143	0.4974467084188869	0.9961677203339624	T	T	T
0.5021779899329840	0.4998255109221716	0.9951355709561273	T	T	T
0.7500137879397323	0.5029185326049570	0.9952478690985538	T	T	T
0.0022301216340004	0.7544043827107085	0.9958165614790078	T	T	T
0.2517835275293240	0.7541878554495668	0.9953173845873023	T	T	T
0.5020197772727408	0.7514463656015751	0.0029658011166706	T	T	T
0.7533989716047050	0.7509788401050013	0.9962522641553208	T	T	T
0.2597441084992406	0.3918755439353721	0.1274549508061442	T	T	T
0.3939772169456646	0.4588397073692343	0.1445706205974070	T	T	T
0.4696555689337190	0.2299587342077666	0.1444816928792704	T	T	T
0.5047249591542268	0.7534989160477003	0.1088030313258949	T	T	T
0.7334064326139162	0.2549956694660732	0.1182545306690196	T	T	T
0.9976214236544659	0.5084109218475065	0.1075798781334772	T	T	T

0.4592097685676926	0.3207259323240193	0.1479858181123204	T	T	T
0.6348085201380725	0.2491161724486392	0.1300159083442158	T	T	T
0.4101247104270039	0.1773549365217571	0.107088965816540	T	T	T
0.1936484030083747	0.2676212990521032	0.1258487041948095	T	T	T
0.4716620648121570	0.6509875066442076	0.1260405025776960	T	T	T
0.4265971046161815	0.7766766757275563	0.1201992393162247	T	T	T
0.1984365116708555	0.4528381635735896	0.1178701216473782	T	T	T
0.7281286090382176	0.1626878108521414	0.1328959647339878	T	T	T
0.8977487787486574	0.4178954937811774	0.1174485170079359	T	T	T
0.9876041432779246	0.5958711807307164	0.1170993627733209	T	T	T

TS: structurel14
structurel14
1.000000000000000
10.2813325984523996 0.000000000000000 0.000000000000000
-5.1406662992261998 8.9038952150168491 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 21.2960046855129015
Cu C O H

48 1 5 11

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
0.1665095586971201	0.0866457589683876	0.9002220284983119	T	T	T
0.4153209012877703	0.0843166939424958	0.8987875826255248	T	T	T
0.6663829147691847	0.0866280551427392	0.9004546202583887	T	T	T
0.9166040454004336	0.0854617724388900	0.8994102158564752	T	T	T
0.1657749839853656	0.3347614480028069	0.8980379196771975	T	T	T
0.4152561448384168	0.3361827713619794	0.8992166239629834	T	T	T
0.6670815517613520	0.3344572558263324	0.9000488861775755	T	T	T
0.9157301114449208	0.3363541288278367	0.9027560692723803	T	T	T
0.1647661205336914	0.5829014960247840	0.9012624971622547	T	T	T
0.4171559060399860	0.5875205908709494	0.9011258446119613	T	T	T
0.6672022113548168	0.5858879578933938	0.8984977318336242	T	T	T
0.9181434563678212	0.5849519947129624	0.9003300688213494	T	T	T
0.1666797822875104	0.8356227823851541	0.8987676377357697	T	T	T
0.4177056880283870	0.8336913627336721	0.9005719284892527	T	T	T
0.6650233617814707	0.8346279852123806	0.9006032203909968	T	T	T
0.9164205627963029	0.8355822572734969	0.8989177230184299	T	T	T
0.9990112043659336	0.0022372783784169	0.9966353501285093	T	T	T
0.2494587052256252	0.0044173648439399	0.9968310067524462	T	T	T
0.4967126036982890	0.0037486073081155	0.9952884752752399	T	T	T
0.7511189093885620	0.0040621357214585	0.9955030330531998	T	T	T
0.9975411382238383	0.2497147654957560	0.9960213558147251	T	T	T
0.2480200629796754	0.2531476038441764	0.9980339322527882	T	T	T
0.4968392541937589	0.2527970376103685	0.9942243024999482	T	T	T
0.7456762226149548	0.2511574696755126	1.0007615758037094	T	T	T
1.0007050029750413	0.5063454538992308	1.0013705419768826	T	T	T
0.2483000743285802	0.4998844833905015	0.9961933783718820	T	T	T
0.5048506712342268	0.5043893971753310	0.9946086192200322	T	T	T
0.7495999919130520	0.5056137990616792	0.9946372900914547	T	T	T
1.0009337635937547	0.7567400250664970	0.9955322684831751	T	T	T
0.2498660653623093	0.7563274235366334	0.9950215563113225	T	T	T
0.5009380547953521	0.7546644758306003	1.0022587232085205	T	T	T
0.7532397935558324	0.7536819568636973	0.9957543108700381	T	T	T
0.2730970936171420	0.4138262147445770	0.1290130695468109	T	T	T
0.4154857029542335	0.4806743738361741	0.1374402068204139	T	T	T
0.4764134530110693	0.2516651447874219	0.1387993953174156	T	T	T
0.5161522818257914	0.7624681346146871	0.1042772202599011	T	T	T
0.7284156890721684	0.2588146697072811	0.1119294131814275	T	T	T
0.9957997757073249	0.5128157764291456	0.1066662330108948	T	T	T
0.4685639337625495	0.3454362505333491	0.1397094080463113	T	T	T
0.6318114805491080	0.2590764659833001	0.1236240922200802	T	T	T
0.4072811288661429	0.1902586150464777	0.1051425296446864	T	T	T
0.2043258527812450	0.2933837425419758	0.1409034812519163	T	T	T
0.4842236113824150	0.6571586581570521	0.1204853652484547	T	T	T
0.4414073099083161	0.7869511364602448	0.1194072114809966	T	T	T
0.2131910590784851	0.4779638185582148	0.1304044103303633	T	T	T
0.7177938850262731	0.1643399885002510	0.1268512680116189	T	T	T
0.8960850791552419	0.4218172331518706	0.1157847095784328	T	T	T
0.9834927199775457	0.5994283969768477	0.1151067013735919	T	T	T
0.2287879799145692	0.3717726386966127	0.0545362594553175	T	T	T

FS: structurel15
structurel15
1.000000000000000
10.2813325984523996 0.000000000000000 0.000000000000000
-5.1406662992261998 8.9038952150168509 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 21.2960046855129015
Cu C O H

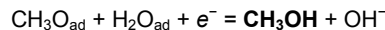
48 1 5 11

Selective dynamics

```

Direct
0.08333333333333357 0.16666666666666643 0.8029049805823973 F F F
0.3333333333333286 0.16666666666666643 0.8029049805823973 F F F
0.58333333333333357 0.16666666666666643 0.8029049805823973 F F F
0.8333333333333286 0.16666666666666643 0.8029049805823973 F F F
0.08333333333333357 0.41666666666666714 0.8029049805823973 F F F
0.3333333333333286 0.41666666666666714 0.8029049805823973 F F F
0.58333333333333357 0.41666666666666714 0.8029049805823973 F F F
0.8333333333333286 0.41666666666666714 0.8029049805823973 F F F
0.08333333333333357 0.66666666666666643 0.8029049805823973 F F F
0.3333333333333286 0.66666666666666643 0.8029049805823973 F F F
0.58333333333333357 0.66666666666666643 0.8029049805823973 F F F
0.8333333333333286 0.66666666666666643 0.8029049805823973 F F F
0.08333333333333357 0.91666666666666714 0.8029049805823973 F F F
0.3333333333333286 0.91666666666666714 0.8029049805823973 F F F
0.58333333333333357 0.91666666666666714 0.8029049805823973 F F F
0.8333333333333286 0.91666666666666714 0.8029049805823973 F F F
0.1660436863858247 0.0828277193612366 0.8988705977931144 T T T
0.4157685756284748 0.0836245435283207 0.8987821089202307 T T T
0.6679019416587817 0.0860821215063373 0.9005435248378815 T T T
0.9163300114528518 0.08319239396467765 0.8988922334515830 T T T
0.1658887598801823 0.3337268933367872 0.8987539368494752 T T T
0.4169230509594152 0.3368179294619955 0.9011488860040264 T T T
0.6667444634712161 0.3328106194347648 0.9005584090960501 T T T
0.9153791025455220 0.3356222147993551 0.9029301760254167 T T T
0.1646251367669360 0.5833101237700704 0.9002293222650728 T T T
0.4188413777481058 0.5848109565371479 0.9033404217560418 T T T
0.6622374893909918 0.5816138845660009 0.9012816863119264 T T T
0.9172167955490580 0.5833819903754819 0.9004579583046732 T T T
0.1671646586284933 0.8341822915215594 0.8987133898422717 T T T
0.4185165131885739 0.8319698471855635 0.9005270085262226 T T T
0.6646202180115645 0.8326930365977661 0.9004454713452773 T T T
0.9155141863629256 0.8329341931287774 0.8987212792773960 T T T
0.9987371394805216 -0.0007939895687298 0.9963876019054971 T T T
0.2486663564919708 0.0002858616869300 0.9965362233065111 T T T
0.4974944854102286 0.0016332016297049 0.9950717797114677 T T T
0.7527885774034169 0.0021207067317517 0.9951059591489817 T T T
0.9995667859983322 0.2480102715271803 0.9955020926278367 T T T
0.2443522119552581 0.2447652713194928 0.9948917923508813 T T T
0.4970868695354924 0.2476804800952725 0.9951253424888568 T T T
0.7473815382824899 0.2482854494554032 0.0019283541883866 T T T
0.0011122104040224 0.5039715909811813 0.0019700466194956 T T T
0.2454887794606060 0.49893305777049542 0.9943300944402964 T T T
0.4935030277348876 0.4936840499905608 0.0065535597779228 T T T
0.7485433132325737 0.5016021620742179 0.9949940529732129 T T T
0.0004883239077435 0.7535907132919893 0.9952815562691539 T T T
0.2500199598261394 0.7538611490705130 0.9950823882085834 T T T
0.5013139477106660 0.7555290393722176 0.0021306498178854 T T T
0.7528647741642371 0.7507575178276467 0.9951938112056212 T T T
0.3174082193229739 0.4233476821580415 0.1305469679911221 T T T
0.4639480003206057 0.4860606069369683 0.1034338028943718 T T T
0.5091852933129480 0.2698898737565700 0.1409052330267077 T T T
0.5362691473810713 0.7616643237883504 0.1016248439018389 T T T
0.7430701804654108 0.2539414587559828 0.1116267879268648 T T T
0.0037302028290048 0.5123950227295951 0.1062447659623693 T T T
0.5050106761444335 0.3636192399734702 0.1266438150875273 T T T
0.6483836977690074 0.2587802678066843 0.1245703431960414 T T T
0.4216856802944487 0.1858700602497522 0.1211657472615037 T T T
0.3261369730721779 0.4305688421146184 0.1823108386042079 T T T
0.5153107065868486 0.6513212185598570 0.1076615528264862 T T T
0.4542481638881479 0.76683244542414761 0.1221451208715228 T T T
0.2579759692309270 0.4827255779886639 0.1149289233447835 T T T
0.7347174137168297 0.1625760778569731 0.1292875576186404 T T T
0.9072873644824587 0.4178570554110360 0.1161009124100364 T T T
0.9876093988316202 0.5954256854849811 0.1173646417570168 T T T
0.2447988232413278 0.3037580676782007 0.1176506249231817 T T T

```



IS: structure115

TS: structure116

```

structure116
1.0000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-5.1406662992261998 8.9038952150168491 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

```

Cu C O H

48 1 5 11

Selective dynamics

```

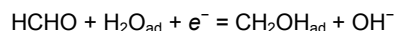
Direct
0.08333333333333357 0.16666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.3333333333333287 0.16666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.58333333333333357 0.16666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.8333333333333286 0.16666666666666643 0.8029049805823975 F F F
0.08333333333333357 0.41666666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.3333333333333287 0.41666666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.58333333333333357 0.41666666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.8333333333333287 0.41666666666666714 0.8029049805823975 F F F
0.08333333333333357 0.66666666666666644 0.8029049805823975 F F F
0.3333333333333287 0.66666666666666644 0.8029049805823975 F F F
0.58333333333333358 0.66666666666666644 0.8029049805823975 F F F
0.8333333333333287 0.66666666666666644 0.8029049805823975 F F F
0.08333333333333358 0.91666666666666716 0.8029049805823975 F F F

```

0.3333333333333287	0.9166666666666716	0.8029049805823975	F	F	F
0.5833333333333358	0.9166666666666716	0.8029049805823975	F	F	F
0.8333333333333287	0.9166666666666716	0.8029049805823975	F	F	F
0.1637531538129409	0.0836289745873060	0.8986594679721237	T	T	T
0.4142297064192277	0.0856261969305479	0.8988656098016605	T	T	T
0.6662986148317387	0.0880766994250735	0.9004353503857417	T	T	T
0.9143034870219610	0.0843551879814086	0.8987492086418315	T	T	T
0.1634630653994549	0.3348772091548682	0.8983011681881480	T	T	T
0.4147358209044541	0.3375472257640411	0.9006053335442914	T	T	T
0.6646935188020819	0.3339413289578062	0.9007348571976550	T	T	T
0.9128902239414246	0.3368781205372927	0.9028403984478643	T	T	T
0.1625158353980680	0.5848083510095564	0.8997226170576553	T	T	T
0.4165788376772853	0.5860517422187500	0.9024940318488534	T	T	T
0.6606085012841804	0.5833299838373308	0.9003901522377192	T	T	T
0.9155594669612556	0.5847695750869236	0.9001691300528023	T	T	T
0.1656066316820599	0.8356002644906582	0.8985025387229157	T	T	T
0.4165577896369186	0.8334248638982374	0.9002285056104284	T	T	T
0.6626316557604285	0.8341951791630252	0.9000749112941548	T	T	T
0.9135415672188502	0.8340694322434602	0.8985315939036768	T	T	T
0.9953314884993959	0.0014615286111379	0.9961870929061548	T	T	T
0.2452623017889763	0.0026243496890288	0.9961580196744322	T	T	T
0.4941044565998781	0.0035245943050626	0.9945146524665702	T	T	T
0.7492102275602974	0.0038462622504909	0.9947158398201027	T	T	T
0.9967049273167775	0.2504692465679454	0.9951181230199496	T	T	T
0.2406777128591813	0.2475510982098186	0.9940708931941771	T	T	T
0.4932642460594963	0.2512472859484163	0.9954816904463613	T	T	T
0.7444605298858278	0.2510325428592637	0.0022548310059562	T	T	T
0.9988935035451761	0.5076848843495939	0.0012472574150735	T	T	T
0.2425617087479069	0.5019793936523201	0.9935345499080910	T	T	T
0.4897877887022091	0.4983833441990981	0.0040265985495225	T	T	T
0.7452481905157526	0.5055048654557766	0.9941022118134769	T	T	T
0.9971489470957310	0.7562687012245918	0.9949596351314726	T	T	T
0.2471893892800381	0.7565477688894263	0.9948519870832229	T	T	T
0.4976476404062922	0.7572579229209496	0.0016427677545039	T	T	T
0.7486549633084892	0.7530506476764885	0.9948227978974630	T	T	T
0.3089852278277263	0.4153153806759705	0.1330077216711416	T	T	T
0.4552119701768476	0.4763168144873050	0.1052094600074156	T	T	T
0.5114687304450953	0.2783649099036154	0.1286993998218549	T	T	T
0.5300080821437234	0.7626425298352686	0.1040081844446092	T	T	T
0.7349364227585369	0.2617434906897316	0.1038203381818690	T	T	T
0.9975114518116328	0.5134747427967596	0.1049545659098357	T	T	T
0.4922185725109998	0.3818692431360092	0.1173214952892323	T	T	T
0.6314801284013570	0.2675104875149473	0.1163010231790196	T	T	T
0.4208469611758830	0.1862944231546209	0.1161685672187005	T	T	T
0.3175184736492653	0.4108371160999198	0.1845559613888312	T	T	T
0.5140422295648790	0.6576701136044748	0.1106782027622799	T	T	T
0.4443967831645424	0.7631339049523406	0.1234674131424996	T	T	T
0.2578705637859642	0.4845761240713032	0.1213444802352797	T	T	T
0.7274605641114108	0.1718858566589745	0.1226800780689601	T	T	T
0.8975339873828646	0.4197818472544768	0.1125901229505359	T	T	T
0.9839005186527459	0.5981015003256829	0.1159146778814773	T	T	T
0.2313865538686954	0.3004146711532911	0.1156479081748785	T	T	T

FS: structure117
structure117
1.0000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-5.1406662992261998 8.9038952150168509 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
Cu C O H
48 1 5 11
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
0.1668608601294298 0.0835082397777190 0.8993951387591967 T T T
0.4169953473024426 0.0836738383523659 0.8992623248652170 T T T
0.6687330982847004 0.0865704269255603 0.9011309447351125 T T T
0.9167873123935871 0.0837191824182581 0.8990993416543208 T T T
0.1667679328737069 0.3340808705783951 0.8990410847642322 T T T
0.4170010406228620 0.3343730947678717 0.8993040312112658 T T T
0.6680160753273905 0.3321751854547018 0.9014936852328644 T T T
0.9151221536006122 0.3347821894190252 0.9039071526150992 T T T
0.1640907150983430 0.5822600990027729 0.9009492189382260 T T T
0.4181831085674944 0.5860167145930412 0.9008844882342683 T T T
0.6668065019467673 0.5834273392439693 0.8991861618542515 T T T
0.9183546239359021 0.5830443555344408 0.9008493948709210 T T T
0.1674880993254835 0.8341421385143410 0.8990330460973148 T T T
0.4188009052016681 0.8321849913055192 0.9006542811751151 T T T
0.6646003663460888 0.8322337151565310 0.9008854633068644 T T T
0.9165912662578583 0.8340007883946009 0.8991285717627838 T T T

0.0013969571224088	0.0004952380455039	0.9967622607485680	T	T	T
0.2502434898480882	0.0013042199238073	0.9968662362172575	T	T	T
0.4974798346934036	0.9997417697479299	0.995353323098957	T	T	T
0.7530413655612586	0.9994578286635639	0.9951437256269443	T	T	T
0.0029638549364395	0.2479910486060711	0.9957413846066999	T	T	T
0.2496423508767995	0.2491808914923115	0.9961373411347877	T	T	T
0.4972313579337660	0.2502582727023435	0.9959015700179371	T	T	T
0.7467970300538253	0.2456339947734940	0.0042625237405062	T	T	T
0.0054396586511562	0.5064481669281554	0.0028876276872421	T	T	T
0.2507726688912705	0.4986214526908092	0.9949608449609592	T	T	T
0.5004274771139039	0.4988301067607933	0.9961167957462439	T	T	T
0.7495831060077743	0.5032589098718612	0.9950971983464482	T	T	T
0.0018634394573415	0.7545636442312315	0.9956105049903763	T	T	T
0.2516831164419747	0.7543806441291359	0.9953089513200447	T	T	T
0.5009318869471219	0.7504844991947928	0.0034363590053292	T	T	T
0.7530627583725433	0.7504459525232812	0.9959567942750911	T	T	T
0.2759356627127456	0.3886500447927429	0.1650546032485904	T	T	T
0.4285753152345913	0.4730462955235978	0.1442405920283493	T	T	T
0.5018927736976877	0.2558031499007273	0.1401336908755242	T	T	T
0.5130140684127082	0.7467335858561801	0.1046598829521736	T	T	T
0.7470185538648386	0.2558407783533338	0.0991854860185087	T	T	T
0.9939629954975193	0.4976118732113353	0.1023028960973945	T	T	T
0.4706150969604668	0.4036754170202875	0.1418388950302052	T	T	T
0.5974309147839937	0.2578042410414866	0.1264992600681445	T	T	T
0.4217983755016716	0.1718686769672560	0.1170053064677638	T	T	T
0.2699647694404573	0.3559637927546787	0.2147230503614961	T	T	T
0.4861772856668153	0.6430422103655272	0.1204368600113960	T	T	T
0.4408911256324659	0.7702836238026337	0.1235370941896169	T	T	T
0.2241269723415728	0.4591399531938572	0.1596668188991869	T	T	T
0.7507557957931655	0.1705308567103670	0.1171508135728358	T	T	T
0.8905184415340642	0.3963768304229994	0.1073620502272658	T	T	T
0.979335327566955	0.5783020615351259	0.1182431784577820	T	T	T
0.2108857446306534	0.2868735356839076	0.1362348012406436	T	T	T



IS: structure113

TS: structure118

```

structure118
  1.0000000000000000
    10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
    -5.1406662992261998    8.9038952150168491    0.0000000000000000
    0.0000000000000000    0.0000000000000000    21.2960046855129015
  Cu      C      O      H
  48      1      5      10

```

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
0.1667939336929402	0.0860276266201188	0.9005667749603898	T	T	T
0.4150487936855488	0.0822839403377068	0.8986468041269494	T	T	T
0.6665641097484444	0.0862385988682800	0.9013147829062365	T	T	T
0.9150836195158998	0.0827098930610178	0.8988282319100597	T	T	T
0.1640603520428187	0.3327433370046565	0.8990171484953672	T	T	T
0.4150677263540796	0.3349708034536928	0.9006182934362075	T	T	T
0.6673555705339846	0.3331267782219784	0.9006313315135988	T	T	T
0.9135906012316088	0.3349952971074191	0.9033314006966550	T	T	T
0.1654264027584093	0.5797978454040597	0.9024204801688828	T	T	T
0.4167275576531599	0.5842789833444141	0.9033280268599035	T	T	T
0.6626442100394863	0.5819647304282061	0.9001887357802820	T	T	T
0.9186375739180181	0.5837416049735413	0.9001099887824042	T	T	T
0.1668087756673137	0.8333140609607761	0.8986224587975297	T	T	T
0.4175909244696528	0.8317164281650617	0.9003755334094152	T	T	T
0.664552051612524	0.8325785288103806	0.9007258685533888	T	T	T
0.9157223491638400	0.8328015823646953	0.8986618448514561	T	T	T
0.9969786860999276	0.9975606541936048	0.9960694405117356	T	T	T
0.2479865939573896	-0.0001028240132950	0.9961704219597327	T	T	T
0.4950344115083354	0.9987298817581620	0.9956031536153839	T	T	T
0.7493666838175292	-0.0004637436647118	0.9958207370747187	T	T	T
0.9922402771539124	0.2437771298040947	0.9946959540210846	T	T	T
0.2422889433524865	0.2483172191316117	-0.0001309676194378	T	T	T
0.4954744279066940	0.2461245728070092	0.9936501732223461	T	T	T
0.7433877356969764	0.2466876779321834	0.0043866881608759	T	T	T
0.0011875326929061	0.5037635748499125	0.0021061656325086	T	T	T
0.2454261836554777	0.4912266669786948	-0.0007402709546518	T	T	T
0.5060885643990771	0.5008183946289430	0.0005650687318147	T	T	T
0.7512046046631110	0.5037522970006996	0.9940907573620645	T	T	T
0.0012417523375007	0.7537630735387052	0.9956204843596856	T	T	T
0.2498545459552876	0.7521395726643234	0.9951921874284357	T	T	T

0.5006599837961780	0.7541864216867000	0.0021876505093886	T	T	T
0.7531356103040681	0.7516089732711435	0.9957579029258395	T	T	T
0.2844659467306749	0.3863837093215313	0.0821812746171071	T	T	T
0.4402656477937035	0.4584999419820287	0.0970921766902122	T	T	T
0.4961072289544436	0.2668241104338540	0.1335415942153678	T	T	T
0.5132620193966596	0.7468907715563966	0.1067403255740376	T	T	T
0.7246289832064166	0.2653519629293189	0.1038435667322585	T	T	T
0.9936330251043323	0.4995645741886701	0.1049421752531444	T	T	T
0.4709428592424764	0.3673491774120446	0.1154041506964494	T	T	T
0.6091389672621021	0.2681978526482361	0.1193704931710879	T	T	T
0.4140580637074745	0.1706919441497634	0.1186175996388716	T	T	T
0.2219201226908052	0.2745432476739088	0.1047817634976216	T	T	T
0.4916762546240933	0.6409957124266038	0.1129535849965955	T	T	T
0.4289347172036569	0.7522215804082524	0.1248344018302346	T	T	T
0.2331248977680932	0.4513209805958688	0.1007618494494665	T	T	T
0.7208647602775400	0.1781796340486625	0.1238226661146587	T	T	T
0.8875637142359066	0.4107626756164610	0.1114452106458072	T	T	T
0.9910385221228658	0.5890615214185995	0.1182182686686814	T	T	T

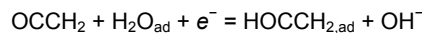
FS: structure119
 structure119
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -5.1406662992261998 8.9038952150168509 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

Cu C O H
 48 1 5 10

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
0.1674834121818147	0.0872359162161929	0.9007605024493601	T	T	T
0.4155515236452021	0.0830879793740568	0.8987341039496671	T	T	T
0.6671559179376324	0.0868359149383244	0.9013767373227326	T	T	T
0.9155425270609714	0.0831806772024624	0.8986751991616980	T	T	T
0.1650558812693135	0.3337048138684824	0.8988934613227128	T	T	T
0.4159017928851528	0.3357007343955988	0.9006712817790447	T	T	T
0.6679560686502111	0.3332619518687783	0.9009019882698404	T	T	T
0.9140483900062067	0.3354388403497642	0.9033684644705774	T	T	T
0.1653710222110412	0.5803256125182590	0.9024521577273504	T	T	T
0.4169984773731198	0.5853342659515350	0.9027759776214501	T	T	T
0.6640024509659678	0.5829352153669503	0.8999534785177203	T	T	T
0.9189990415073884	0.5839973592679849	0.9003011230328923	T	T	T
0.1669411897694726	0.8341395509136119	0.8986453016746775	T	T	T
0.4178163576166325	0.8328805022239595	0.9001876094800844	T	T	T
0.6649248535219874	0.8331781396545415	0.9004878974046343	T	T	T
0.9163608822791209	0.83359245077761366	0.8986292561792902	T	T	T
0.9982804913597926	0.9989756760776372	0.9962079427044159	T	T	T
0.2489474963468122	0.0017557142924866	0.9963657023116655	T	T	T
0.4955179550979714	0.0001631341251357	0.9955755492320524	T	T	T
0.7503698383970507	0.9996793228513962	0.9954937995451230	T	T	T
0.9939538514373130	0.2445169709597116	0.9940921620623997	T	T	T
0.2449170053200150	0.2511119686044576	0.0006733213309191	T	T	T
0.4963082266122501	0.2482799897895081	0.9941474730396148	T	T	T
0.7440678887525926	0.2463071434763978	0.0047106247577880	T	T	T
0.0026366224616871	0.5059801181465721	0.0022788908016341	T	T	T
0.2471910281253408	0.4931573813325384	0.9990186875543031	T	T	T
0.5073643968635528	0.5035786810702630	0.9996617082766144	T	T	T
0.7512543555503990	0.5044275245185561	0.9943327000021223	T	T	T
0.0016774407402502	0.7551463877783235	0.9956398412940497	T	T	T
0.2507272652989065	0.7540017905546875	0.9950659033546944	T	T	T
0.5009896603017652	0.7552588566430116	0.0014858256191411	T	T	T
0.7536884924113428	0.7526683544269628	0.9957760985112964	T	T	T
0.2803060491375359	0.3883489435116912	0.0827781390411227	T	T	T
0.4368306992889343	0.4650630372979997	0.1009407561333629	T	T	T
0.4907852699902374	0.2556882541584734	0.1368973217453024	T	T	T
0.5159085946247614	0.7586410029455725	0.1072937831108995	T	T	T
0.7382120181783587	0.2636680108862531	0.1005840308631298	T	T	T
0.9943208231831572	0.4949644345804579	0.1023104821616710	T	T	T
0.4641571436662975	0.3866128987164394	0.1166141454908094	T	T	T
0.5907064504365567	0.2624075345472477	0.1244301352950557	T	T	T
0.4141831453441595	0.1625435189436066	0.1173701079976016	T	T	T
0.2196912301950712	0.2778259457119980	0.1063288501521478	T	T	T
0.4941828542123003	0.6544002406135413	0.1159885138422607	T	T	T
0.4327546659248394	0.7666768732666727	0.1250808823191022	T	T	T
0.2279189970550255	0.4523744334257047	0.1010846114220403	T	T	T
0.7388659997754981	0.1773094637622592	0.1191650491065917	T	T	T
0.8866741886504907	0.3991308114681381	0.1078188490460528	T	T	T
0.9887814508040359	0.5806176664966131	0.1186932366027907	T	T	T



IS: structure120

```

structure120
1.0000000000000000
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      10

```

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
0.1666097717801575	0.0676634570361662	0.8994741388729730	T	T	T
0.4173782191301026	0.0666132212591511	0.9013806357794807	T	T	T
0.6642899313723216	0.0667939063188355	0.9014047989787665	T	T	T
0.9175808553044684	0.0689851862606224	0.9009843851936108	T	T	T
0.1650416155929966	0.2669756668762587	0.9009918851914053	T	T	T
0.4165167732538327	0.2675016074011283	0.8991304880850216	T	T	T
0.6668116192166409	0.2676594722189458	0.8994622197093198	T	T	T
0.9176609376205314	0.2667714920140651	0.9011709562022265	T	T	T
0.1663747431612111	0.4671636516682082	0.8992437209791628	T	T	T
0.4165319339613680	0.4674376689246964	0.8992953611028552	T	T	T
0.6667816288440056	0.4675017299605417	0.8997187522288067	T	T	T
0.9166442634829451	0.4672902833916341	0.8997463151445487	T	T	T
0.1663776431149456	0.6675022113377733	0.8993137590208427	T	T	T
0.4172169744693418	0.6681979953486248	0.899652766315769	T	T	T
0.6667403967995245	0.6674240007235264	0.8996830031766510	T	T	T
0.9164716592676683	0.6673338094353959	0.9000284623692421	T	T	T
0.1662121444637648	0.8674774673368016	0.8996476108476947	T	T	T
0.4177307173555423	0.8685991570622935	0.9022144652716482	T	T	T
0.6659513749099464	0.8673155131946557	0.9002400002502441	T	T	T
0.9165194128964370	0.8676635077420547	0.8997231641900664	T	T	T
0.0000089226240064	0.0001953866875261	0.9968510257945519	T	T	T
0.2468482455231715	0.0008777322871838	0.9962108859636624	T	T	T
0.4995057645896845	0.0025441247581740	0.0032327452569557	T	T	T
0.7504721933128066	0.0006729086718595	0.9959067348096172	T	T	T
0.0008865467824055	0.2018143004806020	0.0026722161705726	T	T	T
0.2517003292278769	0.2017140170093991	0.9960792593295418	T	T	T
0.5002308766200058	0.2039156513649575	0.9961495560649348	T	T	T
0.7504842012163792	0.2038793822648577	0.9960987573349791	T	T	T
0.0010396648304794	0.4035838659547897	0.9969721831506271	T	T	T
0.2516113186793166	0.4034716508286897	0.9963453889037022	T	T	T
0.4998790922480656	0.4019831900801548	0.9964265513487131	T	T	T
0.7500367753699052	0.4020741741357708	0.9970906398841490	T	T	T
-0.0007807751944580	0.6011844774906641	0.9974431046076464	T	T	T
0.2486328446766816	0.6010940038265450	0.9955589333397173	T	T	T
0.5004524787417162	0.6008126865679146	0.9966048074836136	T	T	T
0.7495479671549560	0.6013045234141268	0.9972167383730002	T	T	T
-0.0010360103188070	0.8007646298045420	0.9975127133063081	T	T	T
0.2458731482316059	0.7995330000535714	0.9962198650370979	T	T	T
0.4995738527496267	0.7992911736403289	-0.0011477256268345	T	T	T
0.7506157288568160	0.8009275852540477	0.9966427950284149	T	T	T
0.3937303268992488	0.3098023929459905	0.1711157262358035	T	T	T
0.4926346294255382	0.2743298838193512	0.1720131629783863	T	T	T
0.3038547969626326	0.3419929167560296	0.1697845361737129	T	T	T
0.2738345206187228	0.5717124134171958	0.1517751323591379	T	T	T
0.9947967232973552	0.1971889602558935	0.1119274898619390	T	T	T
0.5056003702755334	0.7977614689505361	0.1276929657664509	T	T	T
0.4932957726752265	0.9989636616163816	0.1064590323007584	T	T	T
0.2995981694963577	0.5103022661991939	0.1628135215947985	T	T	T
0.2238325849925387	0.5458864707558274	0.1106162651871436	T	T	T
0.5073989870139377	0.2324999617109298	0.2138037174973218	T	T	T
0.5594519298918924	0.2867934756271245	0.1297291782675019	T	T	T
0.4250442792806286	0.7137466916663919	0.1378109950630672	T	T	T
0.9431097827367103	0.2414254122358923	0.1220809960546933	T	T	T
0.0960842397901515	0.2448827236667661	0.1296493917779391	T	T	T
0.6002479129471040	0.7978498396998169	0.1249531129843462	T	T	T
0.4941577525981066	0.9240217746577282	0.1188465201478094	T	T	T
0.3947798015371214	0.9864676704694378	0.1183336053944335	T	T	T

TS: structure121

```

structure121
1.0000000000000000
10.2813325984523996    0.0000000000000000    0.0000000000000000
-6.4258328740327499    11.1298690187710996    0.0000000000000000

```



```

0.000000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
Cu C O H
60 2 5 10
Selective dynamics
Direct
0.0833333333333357 0.1333333333333329 0.8029049805823901 F F F
0.3333333333333285 0.1333333333333329 0.8029049805823901 F F F
0.5833333333333357 0.1333333333333329 0.8029049805823901 F F F
0.8333333333333285 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
0.5833333333333355 0.3333333333333356 0.8029049805823901 F F F
0.8333333333333284 0.3333333333333356 0.8029049805823901 F F F
0.0833333333333357 0.5333333333333314 0.8029049805823901 F F F
0.3333333333333286 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
0.8333333333333283 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
0.8333333333333285 0.9333333333333300 0.8029049805823901 F F F
0.1672003563149421 0.0675261309316383 0.8999656487268359 T T T
0.4173132940239337 0.0651499779672838 0.9009937580679767 T T T
0.6646713517387047 0.0655320089197218 0.9011019979578350 T T T
0.9171890398420810 0.0676463103475343 0.9008292738627938 T T T
0.1644831911585446 0.2649781467906660 0.9016147526857243 T T T
0.4162247105280929 0.2668798695566940 0.8996757782143485 T T T
0.6667877445487987 0.2669565499294197 0.8992368119728348 T T T
0.9173163919936855 0.2654798113720170 0.9008345454498642 T T T
0.1662782296517738 0.4659184963729419 0.8990640731626789 T T T
0.4166615325526338 0.4656106925682569 0.8996347733704109 T T T
0.6649100744634385 0.4655995989788441 0.9006187498907495 T T T
0.9163153595862724 0.4664202968066127 0.8995939346383571 T T T
0.1662854683069033 0.6662985599715994 0.8991755881636242 T T T
0.4171684784384639 0.6670504542324126 0.9002772912773466 T T T
0.6670540271551278 0.6662385108407621 0.8994066820537538 T T T
0.9163276270841412 0.6660613082565593 0.9000073036140120 T T T
0.1665703138784464 0.8663407391118630 0.8995184187239763 T T T
0.4181520841373331 0.8668362462490260 0.9027370000252865 T T T
0.6654833998986185 0.8655568738413644 0.900368686828110 T T T
0.9171338556017631 0.8667430938152155 0.8993841802667709 T T T
0.0001691548411727 0.9982829596230325 0.9963243677112298 T T T
0.2467207275522073 0.9985215032795778 0.9961356047111074 T T T
0.4989027055201307 1.0001069276748729 0.0028702937483894 T T T
0.7497453191215212 0.9983240181600209 0.9954028608488802 T T T
0.9981591649352693 0.1991715972774214 0.0021547726453422 T T T
0.2533645479509994 0.2006221881532706 0.9987956101484892 T T T
0.5000275611997022 0.2011304323608245 0.9948442526429646 T T T
0.7487942509129085 0.2014550539555094 0.9954190521964963 T T T
1.0000165625714987 0.4018428278939931 0.9964778507352311 T T T
0.2503944355771585 0.4020251688068807 0.9953947513242980 T T T
0.4978242010009930 0.3982915228612358 0.0008109527216601 T T T
0.7502012449671159 0.4002944921488425 0.9969848319888244 T T T
0.9990765489672838 0.5994644463945904 0.9975694155829512 T T T
0.2473524414979482 0.5988816421551099 0.9953799924974800 T T T
0.5012619317061071 0.5984146143512601 0.9957867589163292 T T T
0.7494183994492352 0.5993465940793360 0.9972429441197027 T T T
0.9993071783364909 0.7989900892487172 0.9973762429582969 T T T
0.2453186512639660 0.7971984085151030 0.9962219074342252 T T T
0.4999816991885682 0.7964129676197332 0.0004695522770287 T T T
0.7521483500411805 0.7991676671445547 0.9960800848036131 T T T
0.3731234809042577 0.3032543634808433 0.1187853062390418 T T T
0.4502932706059221 0.2520313244902497 0.1392654750886461 T T T
0.2921260055671678 0.3448492174048275 0.1316032841301671 T T T
0.2930872798250535 0.5694302858810671 0.1474302912477659 T T T
0.9909543310455637 0.1951000364403606 0.1061144977602022 T T T
0.5114914272876897 0.7888494396653438 0.1151962993439470 T T T
0.4930606946730285 0.9909381700964406 0.1063422579055273 T T T
0.3138710020753710 0.5026082109670339 0.1443188506876281 T T T
0.2187374814007329 0.5520581971104677 0.1141260373787320 T T T
0.4478696543390167 0.2376146248547599 0.1901604543670601 T T T
0.5173426685580207 0.2285339027336657 0.1095019542089573 T T T
0.4341152183018909 0.7049082347650018 0.1291852523582070 T T T
0.9322092470163156 0.2318487275621635 0.1193570178751757 T T T
0.0954975717785248 0.2497203764132347 0.1205027296108925 T T T
0.6102024362810712 0.7969976541167194 0.1212961867848511 T T T
0.4945703414314649 0.9156106762809957 0.1166228460549856 T T T
0.3961450972114365 0.9786924389728467 0.1205612964094508 T T T

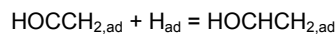
```

```

FS: structure122
structure122
1.0000000000000000
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 10
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
0.1692190845760951	0.0697418042174806	0.9005037247694219	T	T	T
0.4174176118636718	0.0653150369259222	0.9003702787403172	T	T	T
0.6649803011601823	0.0662169951549891	0.9012507714326414	T	T	T
0.9180282359389560	0.0682539077564534	0.9006178000638911	T	T	T
0.1655755598470859	0.2649438707293965	0.9026665575048607	T	T	T
0.4154252609197034	0.2683356840541911	0.9008678818453777	T	T	T
0.6671188308123346	0.2680754666543594	0.8988590185609500	T	T	T
0.9178261149756824	0.2662965841871205	0.9006957213974376	T	T	T
0.1667482160004088	0.4666289060225000	0.8989451484557454	T	T	T
0.4168662844104015	0.4664178352598898	0.8997373843316303	T	T	T
0.6619538677696029	0.4654095955720392	0.9021168967405260	T	T	T
0.9159484309276146	0.4671715916808818	0.8993340995918923	T	T	T
0.1666196324635772	0.6668386238881275	0.8991489852377343	T	T	T
0.4176784997858375	0.6688398744650768	0.9006459735490430	T	T	T
0.6678677919328795	0.6671544871935046	0.8991864294934178	T	T	T
0.9169523413539327	0.6666793768994115	0.8996812259318828	T	T	T
0.1671132721840303	0.8666251981584452	0.8990519443066868	T	T	T
0.4194467133706905	0.8670452556885033	0.9034502746086991	T	T	T
0.6653283097431375	0.8658982912160231	0.9006957757690061	T	T	T
0.9183048910057173	0.8673985178510598	0.8990282006276575	T	T	T
-0.0003846576391698	0.9981938540984434	0.9959673122187922	T	T	T
0.2462659388724468	0.9968141822954911	0.9948897992741733	T	T	T
0.4996067776283659	0.0017514081565732	0.0028521179309523	T	T	T
0.7520326419170513	0.0005890554967140	0.9950053961811378	T	T	T
0.9979452510151260	0.2001671974689110	0.0022471503909817	T	T	T
0.2520082320481320	0.1964257284246000	0.0023811465161574	T	T	T
0.5053742500153682	0.2015880032232341	0.9927305645817660	T	T	T
0.7510569219913865	0.2029731318000403	0.9955214797876043	T	T	T
-0.0005763818374767	0.4025210055519630	0.9960169303429122	T	T	T
0.2490124483935564	0.4039614105018107	0.9941425128700901	T	T	T
0.5023476908608133	0.4076644840432985	0.0064525128975523	T	T	T
0.7513252786151541	0.4018960621906696	0.9967162632415701	T	T	T
-0.0005541660018762	0.6004797898159269	0.9974655832041172	T	T	T
0.2466328704292781	0.5997121417387592	0.9952568368473241	T	T	T
0.5038779274268766	0.6027912574104907	0.9943292736824627	T	T	T
0.7530296553952239	0.6027419869179604	0.9970623976611038	T	T	T
0.0005359665245981	0.8000988261547035	0.9973602395714133	T	T	T
0.2447129229142642	0.7976269996598537	0.9958578820118875	T	T	T
0.5027831965330686	0.7979110434423492	0.0029166782959011	T	T	T
0.7555818286867381	0.8011162979362153	0.9955770850821958	T	T	T
0.3811698535823821	0.3312670348722981	0.0830631227591591	T	T	T
0.3508579707493534	0.2146062660800243	0.0965416225148891	T	T	T
0.3009447086969542	0.3667325228324808	0.1195875393180731	T	T	T
0.3328517051930834	0.5766322422728588	0.1350086374645294	T	T	T
0.0037417741594128	0.1972386851635138	0.1058873956482161	T	T	T
0.5161419249466599	0.7967316364590911	0.0982815208997444	T	T	T
0.4909542475660894	0.9834089155835852	0.1024032935362030	T	T	T
0.3307252859534289	0.4556649494739036	0.1180231448266597	T	T	T
0.2339615068348017	0.5672276205350553	0.1275392122416437	T	T	T
0.2734213685814518	0.1632382103458107	0.1348129336334934	T	T	T
0.4390184123319435	0.1917581179957498	0.0877915629289309	T	T	T
0.4079026907511879	0.6632613354463180	0.1219344633402892	T	T	T
0.9317951114288824	0.2181735194682380	0.1229617453817343	T	T	T
0.1054827382826119	0.2622286110990764	0.1188338534337640	T	T	T
0.6180162857134052	0.8177688811361991	0.1103787486172846	T	T	T
0.4994860667370295	0.9058056454256804	0.1069874058551292	T	T	T
0.3931033338178209	0.9637713508827339	0.1192300713718838	T	T	T



IS: structure75 + 1/2H₂

TS: structure123

```

structure123
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710996      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

Cu C O H

60 2 2 6

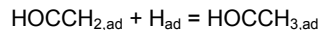
Selective dynamics

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
0.3333333333333285	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
0.1687627095001268	0.0697951411999782	0.901329553095275	T	T	T
0.4167166473580137	0.0669910375971036	0.8989466535643846	T	T	T
0.6679836335757735	0.0677770967922808	0.9000444345454311	T	T	T
0.9175094839295082	0.0675586046393547	0.9001347209300529	T	T	T
0.1678214404768303	0.2664966269998009	0.9017944174354171	T	T	T
0.4159416580243236	0.2679705288543773	0.9018077402347243	T	T	T
0.6683950490768830	0.2690089559264207	0.899576605091226	T	T	T
0.9174134043784358	0.2679818921703656	0.8998508548301326	T	T	T
0.1661028200141758	0.4671696370858398	0.8995896500560083	T	T	T
0.4175251119005644	0.4662303629115374	0.9010132976596250	T	T	T
0.6638286963196842	0.4664551227787324	0.9016619223456090	T	T	T
0.9146724367245480	0.4671149996872919	0.9007329457896646	T	T	T
0.1656627422417127	0.6671960925568231	0.8995831489467948	T	T	T
0.4157579421608024	0.6673850924121436	0.8989338390446620	T	T	T
0.6668924272990298	0.6675113072826591	0.8993765717456769	T	T	T
0.9169895756687283	0.6675123486229259	0.8996444565545069	T	T	T
0.1665697507575997	0.8672148274416940	0.8995511414531130	T	T	T
0.4168179450295260	0.8671533705988522	0.8995052289036467	T	T	T
0.6670446498382925	0.8674545612851285	0.8999025627050353	T	T	T
0.9174114428075160	0.8675965006217757	0.8998619203025560	T	T	T
0.9991537767561260	0.0006357587080410	0.9971981851172501	T	T	T
0.2501262541688494	0.9988769411894548	0.9956683722741265	T	T	T
0.5011520929178650	0.9991187241770400	0.9967577921068349	T	T	T
0.7503218296277845	0.0007497133734862	0.9973919479290009	T	T	T
0.9982021860970854	0.2009941094700012	0.9969568011103581	T	T	T
0.2477429456515796	0.1987874523048699	0.0046729784680105	T	T	T
0.5058838324951797	0.1964132118694159	0.9935147147597565	T	T	T
0.7524009209766338	0.2013489454849246	0.9969966511599652	T	T	T
0.9989080480499752	0.4018438146722055	0.9969814516181875	T	T	T
0.2487321951273673	0.4036741961550312	0.9961468944719808	T	T	T
0.5004904045325562	0.4063045018528478	0.0036373644908183	T	T	T
0.7466378677245347	0.4004710703616223	0.0006183804646780	T	T	T
0.9993927782933945	0.6016121437531725	0.9971783869524566	T	T	T
0.2488177291329552	0.6022096915152368	0.9963739296220234	T	T	T
0.5004036591495232	0.6052511900194808	0.9947334016397641	T	T	T
0.7533784106238345	0.6061912494450697	0.9964131880405266	T	T	T
0.0011233642527797	0.8021376247318091	0.9972004866399500	T	T	T
0.2499420964874833	0.8008726441267305	0.9970069173150705	T	T	T
0.4998445606940134	0.8015733952660261	0.9967562786870879	T	T	T
0.7506039821778356	0.8022936020886557	0.9971714373046998	T	T	T
0.4132593977079651	0.3382930706052025	0.0889697097069199	T	T	T
0.3382849269815955	0.2125807057942990	0.0966605006039685	T	T	T
0.3922959193522212	0.4011461395196156	0.1329795836433550	T	T	T
0.4988820760535453	0.6358998919016073	0.1371330678101007	T	T	T
0.4376580976296133	0.4903438107120379	0.1252133635681893	T	T	T
0.4148610335350916	0.6511567515508498	0.1347920823897473	T	T	T
0.2566786869713416	0.1738877745195382	0.1349872964208707	T	T	T
0.4030403159851980	0.1669497746422873	0.0886507491416328	T	T	T
0.5676548061020386	0.6874618053682676	0.1038522446744360	T	T	T
0.5847258317656231	0.3737207419773010	0.0575804591213737	T	T	T

FS: structure80



IS: structure75 + 1/2H₂

TS: structure124

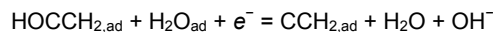
structure124					
1.0000000000000000					
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000			
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015			
Cu	C	O	H		
60	2	2	6		
Selective dynamics					
Direct					
0.0833333333333357	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
0.3333333333333285	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
0.1681093431722042	0.0685874226257142	0.8999762924571163	T	T	T
0.4158922824566988	0.0663225306378028	0.8993216806178564	T	T	T
0.6679028752446171	0.0673297999091646	0.8998392273100240	T	T	T
0.9176901698989827	0.0667034709630472	0.9002252988085722	T	T	T
0.1678013019196213	0.2662946231939796	0.9008112234452970	T	T	T
0.4162020359375547	0.2674443015996795	0.9016062143217594	T	T	T
0.6690034905973423	0.2688112773768803	0.8987609606746370	T	T	T
0.9173789319849504	0.2676545190651500	0.8994253807367684	T	T	T
0.1669611777653178	0.4671991117144275	0.8994127903242326	T	T	T
0.4178612093314784	0.4663072367346824	0.9006816956356127	T	T	T
0.6622875699300304	0.4651898136910327	0.9024361825365815	T	T	T
0.9169249326029785	0.4679611632334330	0.8998628566827975	T	T	T
0.1664339153707303	0.6675756269289854	0.8994810608186558	T	T	T
0.4169562108715358	0.6673967971047613	0.8992425625011953	T	T	T
0.6673690923715696	0.6671593411952996	0.8995482587753325	T	T	T
0.9163855923731746	0.6668790860565234	0.8999342821993600	T	T	T
0.1664839297812746	0.8669793890193765	0.8997152535004694	T	T	T
0.4173268230747152	0.8669807723789229	0.8996049545082788	T	T	T
0.6671219103348538	0.8671796846464968	0.8999147249562979	T	T	T
0.9170292965835363	0.8673496075933214	0.9001549889276880	T	T	T
0.0005477689332145	0.9999942764064031	0.9986089554959346	T	T	T
0.2482338655858465	0.9989724512342674	0.9965713974123077	T	T	T
0.5007631279856049	0.9993682016687409	0.9963700568256408	T	T	T
0.7505760490965870	0.0000620709021363	0.9968946747652836	T	T	T
0.9966613676452011	0.2009483149201856	0.9960493858142931	T	T	T
0.245625210530932	0.1993796185208450	0.0007426770104779	T	T	T
0.5100486766261173	0.1995407597841792	0.9926546162236189	T	T	T
0.7529361037164195	0.2010136473978950	0.9968477048071076	T	T	T
0.0007332280125870	0.4020286722503069	0.9968214523467424	T	T	T
0.2476654804251250	0.4019757474301794	0.9954324237788766	T	T	T
0.4997622156309255	0.4000327938882946	0.0068261695408797	T	T	T
0.7525573297483349	0.4015233995620944	0.9971929802245197	T	T	T
0.0008798406943834	0.6015468056355706	0.9971162985863017	T	T	T
0.2508041615796319	0.6019921101562071	0.9959552159700300	T	T	T
0.5019578344190081	0.6037747139418300	0.9950818825935117	T	T	T
0.7499382895785036	0.6016812059329327	0.9972680740415543	T	T	T
0.9994747831227916	0.7994945759423966	0.9971896398997164	T	T	T
0.2503920376995242	0.8010610810082976	0.9967544582030027	T	T	T
0.5004525897000277	0.8011077391624252	0.9968953741983942	T	T	T
0.7508134714235633	0.8013115820923651	0.9972283901757464	T	T	T
0.3877027683512104	0.3243360855928766	0.0849876302846477	T	T	T
0.3354078258074002	0.2005573784396762	0.1001265073458425	T	T	T
0.3348700696357652	0.3733644598048857	0.1261500346817703	T	T	T
0.4139688504453178	0.6046594010438003	0.1377739074256295	T	T	T
0.3746112503406864	0.4620318725912443	0.1208619838955998	T	T	T
0.3213886061360098	0.6068390599936860	0.1305599547667221	T	T	T
0.2684523064374551	0.1657551305051724	0.1432558503695684	T	T	T
0.4144205816406353	0.1678681732405948	0.0922311505746457	T	T	T
0.4853036531531684	0.6644857919187266	0.1079526669804220	T	T	T
0.2086831357697954	0.0963721110086992	0.0544351134669847	T	T	T

FS: structure125
structure125
1.0000000000000000
10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-6.4258328740327499 11.1298690187710996 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015
Cu C O H
60 2 2 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
0.1670878056547879	0.0682192607274120	0.9000585752342570	T	T	T
0.4161739018310450	0.0674076349062333	0.8995331748438490	T	T	T
0.6666582116950591	0.0677926725556799	0.8998960645379819	T	T	T
0.9167806299258171	0.0678931659004712	0.9001126794919075	T	T	T
0.1666528335896892	0.2678691150183269	0.9000279475750667	T	T	T
0.4175324362641512	0.2699532398995118	0.9018896569246478	T	T	T

0.6669937062988033	0.2684229137965714	0.8997982168602583	T	T	T
0.9168651577489229	0.2680466954279101	0.8999566085578525	T	T	T
0.1669411046298979	0.4676235974315857	0.8995866792233014	T	T	T
0.4179892554923644	0.4662375557182233	0.9022490130588576	T	T	T
0.6628621641314867	0.4663592509597882	0.9026122771542305	T	T	T
0.9165101039577179	0.4679293907079120	0.8999132046646970	T	T	T
0.1660139246652619	0.6678543517842109	0.8995619978165781	T	T	T
0.4163637369899538	0.6675655216287333	0.8990878763973442	T	T	T
0.6670884480161705	0.6675404745695356	0.8998270141458309	T	T	T
0.9157227660598719	0.6670963918798631	0.9002412342513282	T	T	T
0.1661618561750821	0.8675299641037972	0.8999718537382375	T	T	T
0.4162997233541910	0.8675689964928738	0.8997322971590959	T	T	T
0.6667554664418348	0.8676966426042646	0.8998442170942513	T	T	T
0.9166909069996729	0.8677676202217045	0.9000909077756416	T	T	T
0.9997341396331889	0.0018853213534939	0.9974016199271871	T	T	T
0.2495139190638314	0.0017816048677759	0.9969536436731561	T	T	T
0.4998171110345936	0.0012164713399710	0.9970870737694205	T	T	T
0.7495423237771672	0.0018419973077906	0.9973013246556758	T	T	T
0.9991146553800532	0.2017768488025049	0.9972424234158045	T	T	T
0.2476851370642234	0.2012075229419855	0.9972105507054054	T	T	T
0.5001921607565368	0.1992057879533615	0.9950663832301188	T	T	T
0.7503810009200342	0.2018502361563917	0.9967995271478193	T	T	T
0.9999399215319201	0.4025200744406668	0.9973511661066916	T	T	T
0.2466934714687140	0.4016116374434495	0.9968398698411944	T	T	T
0.4976402918247420	0.4020488304072289	0.0125080968359929	T	T	T
0.7514916942485811	0.4024018464257272	0.9968452087123384	T	T	T
0.0000713732045673	0.6023226837082217	0.9973536230584510	T	T	T
0.2494316513514474	0.6025361281948993	0.9957220965717879	T	T	T
0.5008139655221913	0.6050165474131028	0.9954561911020459	T	T	T
0.7501751117242568	0.6029110530428711	0.9976907307678125	T	T	T
-0.0002122048780133	0.8022606541427233	0.9973220166762972	T	T	T
0.2500280430005904	0.8021356657147919	0.9972636923343572	T	T	T
0.4997690354916270	0.8025093581551485	0.9968841284260909	T	T	T
0.75005672727799664	0.8025902687840575	0.9975076869513806	T	T	T
0.4884663906033685	0.3817969944753242	0.1038291508767720	T	T	T
0.5052503221524175	0.2846599978297663	0.1352101089744260	T	T	T
0.4669563868561581	0.4441590366106135	0.1463093547568314	T	T	T
0.3966173952642200	0.6091568188913058	0.1346062846195287	T	T	T
0.4451278136474822	0.5105065765017608	0.1320203044154582	T	T	T
0.2909552316769718	0.5721412643211869	0.1219300942785631	T	T	T
0.5369078496302617	0.3053536534034935	0.1849871575620963	T	T	T
0.5848489743528341	0.2662521596733462	0.1098158708941415	T	T	T
0.4488704445366107	0.6710104097547772	0.1019122127788107	T	T	T
0.3948415438264411	0.2013396241010771	0.1327360948886477	T	T	T



IS: structure126
 structure126
 1.0000000000000000
 10.2813325984523996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -6.4258328740327499 11.1298690187710640 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 21.2960046855129015

	Cu	C	O	H	
	60	2	4	9	

Selective dynamics

Direct

0.0833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.1333333333333329	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.3333333333333357	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.5333333333333314	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.7333333333333343	0.8029049805823902	F	F	F
0.0833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.3333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.5833333333333357	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.8333333333333286	0.9333333333333300	0.8029049805823902	F	F	F
0.1667478453737520	0.0669832236896525	0.8988237358587323	T	T	T
0.4168442695247543	0.0679490313377579	0.8995973987325959	T	T	T
0.6668727049235237	0.0679989143823854	0.8998475339483782	T	T	T
0.9173938136262173	0.0681380259982454	0.8997105444609773	T	T	T
0.1679959638013662	0.2699627473156407	0.9010429247164792	T	T	T
0.4177704738046684	0.2692640168913523	0.9003729178131572	T	T	T
0.6680158081734934	0.2688151068364472	0.8998226881317873	T	T	T
0.9172470356839652	0.2682083001226653	0.9000816203636715	T	T	T
0.1690606883356902	0.4663691085815419	0.9020559148599020	T	T	T
0.4160435445535067	0.4659264896251204	0.9026165068853791	T	T	T
0.6623841681874361	0.4664227295485345	0.9021225722917816	T	T	T
0.9167418166087822	0.4682088157216779	0.8996582541442485	T	T	T
0.1659322954303479	0.6675415760402715	0.8994097147414805	T	T	T
0.4164150006438415	0.6673750547482472	0.8993874613063227	T	T	T
0.6676562891310758	0.6691879076037627	0.9013988715303155	T	T	T
0.9164774438450832	0.6675808948073367	0.8994149235448159	T	T	T
0.1664574566307925	0.8673211305949271	0.8993737181736580	T	T	T

0.4171236822913434	0.8680882234906542	0.8994387983280028	T	T	T
0.6681244735126635	0.8670697405018002	0.9017558421831421	T	T	T
0.9145130623086111	0.8665874014817350	0.9013154724258056	T	T	T
0.0014686834943726	0.0032957168915289	0.9960439721038981	T	T	T
0.2505923488399354	0.0009019879294193	0.9964432909800505	T	T	T
0.5002309746947429	0.0019565174376665	0.9971868591710231	T	T	T
0.7509134660920218	0.0046933863827646	0.9964006966051645	T	T	T
0.9987676754808318	0.2020630314223718	0.9970931597314032	T	T	T
0.2457971920420612	0.1961263712234781	0.9933993694846782	T	T	T
0.5023212624570919	0.2009944867325754	0.9956875067135800	T	T	T
0.7504440210732777	0.2026448124888480	0.9971618292002622	T	T	T
0.9987232242390007	0.4025414771430471	0.9970683047177511	T	T	T
0.2467490116731741	0.4028359621361949	0.0078117974928279	T	T	T
0.5039913200061875	0.4015472383102888	0.0059702883655528	T	T	T
0.7521791085167354	0.4027643635397722	0.9974603355590836	T	T	T
0.0004844387067294	0.6024863738131895	0.9972031369186990	T	T	T
0.2495787741666604	0.6045183626761567	0.9957296559885412	T	T	T
0.5007862534861562	0.6051117754725338	0.9950574647109083	T	T	T
0.7529372044989112	0.6027260502594360	0.9961020924139699	T	T	T
0.0031818980854282	0.8023135760218580	0.9966373202359020	T	T	T
0.2506985680039921	0.8029395072717989	0.9973193644594004	T	T	T
0.4983857171887658	0.8033874441513332	0.9964783421220208	T	T	T
0.7519260870952842	0.8037354865675754	0.0042236999832307	T	T	T
0.3532988142756149	0.4102035359947163	0.0869938468344116	T	T	T
0.4036817024450217	0.3293943374382551	0.0989733576601442	T	T	T
0.4095199996501304	0.5047880277881365	0.1276898381003768	T	T	T
0.2737055887590220	0.6338096824769883	0.1367712735684396	T	T	T
0.7161884425784236	0.6131752415588044	0.1562531192184030	T	T	T
0.7518488203763342	0.8133754921702295	0.1048945401057961	T	T	T
0.3593968892562336	0.5549926378554838	0.1241047704754980	T	T	T
0.1682823941737180	0.5873656261750442	0.1239208867049859	T	T	T
0.3150755022257014	0.7042519502841658	0.1088673590668037	T	T	T
0.3321408607503867	0.2343098304822654	0.0863241070541770	T	T	T
0.4779983899249914	0.3435807181817278	0.1390699265002700	T	T	T
0.6051946073064535	0.5672376331346791	0.1526701422747191	T	T	T
0.7516167628002185	0.5741205505086185	0.1269165403495473	T	T	T
0.7487164178531808	0.7414991057400335	0.1261065454993002	T	T	T
0.8391569477289726	0.8851570897503337	0.1211727984625129	T	T	T

TS: structure127
structure127
1.0000000000000000
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 9
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
0.1684850050387626	0.0706880611117926	0.8998754710732606	T	T	T
0.4169120149794417	0.0682851509025535	0.8992494955425795	T	T	T
0.6663530010332963	0.0683603816980144	0.8997264866620601	T	T	T
0.9171510803836265	0.0689526499695484	0.8994907740583158	T	T	T
0.168665677962989	0.2695695701226851	0.9001114390799553	T	T	T
0.4178740481829442	0.2691909249010545	0.8993803358598021	T	T	T
0.6682664473818829	0.2692098081968394	0.8993130725964840	T	T	T
0.9174596527845862	0.2693573975985203	0.8995723593284513	T	T	T
0.1706294213286372	0.4676079809673027	0.9016153000840523	T	T	T
0.4192336989178855	0.4702546445417567	0.9014009606980139	T	T	T
0.6660812911591290	0.4687373280259989	0.9004334291995653	T	T	T
0.9190881326774225	0.4695513333989317	0.8991810209315473	T	T	T
0.1674818293028800	0.6690201151308004	0.8994114658169386	T	T	T
0.4187885643137451	0.6683561440062480	0.9011218862524586	T	T	T
0.6661969173423543	0.6702478292672310	0.9037954569733140	T	T	T
0.9175931055113639	0.6695304693542913	0.8994230727717495	T	T	T
0.1671244305627126	0.8696359600285851	0.8993857205896373	T	T	T
0.4168269640330763	0.8685746922806462	0.8995199762647729	T	T	T
0.6685983080013427	0.8682066097523725	0.9018460644939071	T	T	T
0.9152560425715521	0.8683061925787429	0.9011757987222923	T	T	T
0.0056876207753314	0.0081198647979867	0.9953892779139911	T	T	T
0.2515016359296521	0.0041556405307967	0.9967482735255884	T	T	T
0.5002721092826555	0.0033614450518635	0.9971481427158505	T	T	T
0.7511527151565133	0.0065717807063829	0.9964374034368638	T	T	T
0.9974282114940556	0.2025496306627276	0.9960286510201291	T	T	T
0.2527419434281788	0.2039777103817533	0.9993684624325747	T	T	T

0.5028306743363565	0.2007022831317597	0.9953953045941669	T	T	T
0.7509502274605342	0.2037035919984441	0.9965701233559188	T	T	T
0.0019941114369122	0.4038905102627982	0.9966608163154658	T	T	T
0.2483460540514752	0.3988929340344606	0.0026703257601268	T	T	T
0.5067635896464326	0.4002354124787496	0.9988769529786897	T	T	T
0.7549206174773819	0.4033990865448601	0.9960494435397047	T	T	T
0.0020684378954134	0.6035654584313015	0.9973991340435439	T	T	T
0.2481741005934295	0.6046857485924854	0.9958962898695294	T	T	T
0.5017456562591285	0.6072859792461880	0.0015157017198861	T	T	T
0.7560343680863769	0.6031109637365646	0.9959538054589832	T	T	T
0.0040702833118917	0.8041913081087599	0.9964898377407296	T	T	T
0.2504948986716418	0.8045334774653634	0.9973404348178876	T	T	T
0.4993082668940625	0.8065562807008673	0.9964461878963397	T	T	T
0.7564763124787763	0.8088117183383089	0.0040721668519972	T	T	T
0.3559334485968144	0.3573038082134125	0.0671971544127841	T	T	T
0.3644858659044264	0.3204584134076948	0.1252026283907021	T	T	T
0.4479078602264700	0.5468722496300361	0.0893702538184726	T	T	T
0.2416278915848963	0.6105166971727550	0.1412040668225043	T	T	T
0.6968201793081198	0.6225484087581570	0.1554951492978354	T	T	T
0.7700651293327407	0.8279309902609991	0.1034587436940258	T	T	T
0.3717145785799628	0.5629934850718468	0.1088887078185896	T	T	T
0.1564152271718124	0.5814831013233208	0.1120176618047218	T	T	T
0.2941558831152110	0.6975857993769899	0.1355321347745123	T	T	T
0.3466868751476960	0.2297926981034649	0.1320907552380872	T	T	T
0.3888340670234238	0.3765879121468758	0.1669887292106761	T	T	T
0.5963590212050561	0.5841601278336624	0.1328778862543197	T	T	T
0.7506534940416170	0.5844618190144344	0.1382732876418080	T	T	T
0.7539785114483841	0.7521011472350222	0.1261485671027747	T	T	T
0.8660970398322508	0.8946478357143840	0.1172707035115941	T	T	T

FS: structure128

```

structure128
1.0000000000000000
10.2813325984523996      0.0000000000000000      0.0000000000000000
-6.4258328740327499      11.1298690187710640      0.0000000000000000
0.0000000000000000      0.0000000000000000      21.2960046855129015

```

```

Cu      C      O      H
60      2      4      9

```

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
0.1655315116122163	0.0686022714823222	0.9027071537532404	T	T	T
0.4169240462353412	0.0677233505392801	0.8996776092982964	T	T	T
0.6689325614565499	0.0667828713468360	0.9019214343926727	T	T	T
0.9168825141492832	0.0672573168812808	0.9011078774185094	T	T	T
0.1682942976375161	0.2681173404268178	0.8992465373744060	T	T	T
0.4162394404660055	0.2679127578095554	0.8997250811018922	T	T	T
0.6663576666143450	0.2680023231933534	0.8993809087541763	T	T	T
0.9160613877615387	0.2686704330567374	0.8988236209711361	T	T	T
0.1676619507360859	0.4669367522965062	0.9001032896493557	T	T	T
0.4178738712618084	0.4696650041136383	0.9022463954116845	T	T	T
0.6634250094330317	0.4662651114772601	0.9006314185056995	T	T	T
0.9167931498664557	0.4687200543593149	0.8995654865740179	T	T	T
0.1667639141300790	0.6683176360147628	0.8992109567048876	T	T	T
0.4186888143939346	0.6668229315934810	0.9012514217422394	T	T	T
0.6644171268083168	0.6657207880041368	0.9007741267200949	T	T	T
0.9172633760440448	0.6679462710543135	0.8991984480668043	T	T	T
0.1681025385502318	0.8682914536071075	0.8994699305488907	T	T	T
0.4170759266064977	0.8675844230641383	0.8996667483334364	T	T	T
0.6692358268351017	0.8692259031069618	0.9011926520185487	T	T	T
0.9187329055460361	0.8688456153138173	0.9003364946072799	T	T	T
0.0042589662136883	0.0018452832147753	0.0005879199191576	T	T	T
0.2523997004862198	0.0003593240176429	0.9969902164142604	T	T	T
0.5002780965012572	0.0017077094254500	0.9975009705482735	T	T	T
0.7498532142697610	0.0040082707335831	0.0026574301890243	T	T	T
0.0005299899435077	0.2086092667018213	0.9931269350490883	T	T	T
0.2516154156779811	0.2003125496870875	0.0006018702501795	T	T	T
0.5026099787585806	0.2009852921331605	0.9963394060686263	T	T	T
0.7501401243349773	0.2040136497570719	0.9966840574582900	T	T	T
0.9985843317415403	0.4042376801671155	0.9972124287781861	T	T	T
0.2446943845447982	0.4027661552558688	-0.0002187561305892	T	T	T
0.5041760815388372	0.4003483065372890	0.0012270653319071	T	T	T
0.7513143518108197	0.4023904977777938	0.9967819925231340	T	T	T
0.0011082046148771	0.6027510057376183	-0.0020207266378476	T	T	T
0.2467069096119829	0.6025107228968564	0.9951709552335257	T	T	T
0.5018735901368728	0.6064594540824367	0.0043630190778444	T	T	T

0.7533199334968922	0.6007994639557632	0.9957916541655797	T	T	T
0.0027231112475399	0.8001112120927572	0.9962866399506733	T	T	T
0.2503484793501600	0.8018367921961823	0.9971531113865231	T	T	T
0.5001285885602654	0.8046927131076383	0.9955492535079786	T	T	T
0.7517359449569344	0.7978761522979837	0.9942434796839454	T	T	T
0.3313800798989017	0.3378776617966540	0.0588625306061420	T	T	T
0.3180619227693677	0.3168802312228685	0.1211142842445346	T	T	T
0.5082791669901452	0.6280163162022563	0.1009652288596496	T	T	T
0.2779026033485605	0.6642057248024437	0.1438994398956246	T	T	T
0.7777456516345598	0.8017800136723541	0.1384049653268162	T	T	T
0.8830120358614315	0.0065042895027763	0.0754728338890009	T	T	T
0.4274364280292932	0.6409125303297090	0.1182987581209649	T	T	T
0.1943007289301317	0.6213731665858854	0.1142656824632698	T	T	T
0.3099924344622019	0.7485930900228951	0.1360836756056829	T	T	T
0.2303631528414218	0.3196556752211765	0.1490916607669741	T	T	T
0.3978089142556649	0.3005042707481034	0.1472980160732208	T	T	T
0.6075998895366181	0.6954020043831879	0.1163921534469660	T	T	T
0.8525010374664732	0.7776171184009262	0.1311512509577793	T	T	T
0.8202695923092276	0.8836252115914499	0.1183775372173493	T	T	T
0.9322128219492174	0.0815800593244690	0.0991890409658652	T	T	T

CHCH_{ad} + H_{ad} = CHCH_{2,ad}

IS: structure87 + 1/2H₂

TS: structure129

structure129		
1.0000000000000000		
10.2813325984523996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-6.4258328740327499	11.1298690187710996	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	21.2960046855129015

Cu	C	H
60	2	3

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
0.1655293659846033	0.0662206245951122	0.9008316032463737	T	T	T
0.4172095946819924	0.0678487706485861	0.9005994985573783	T	T	T
0.6655948262853576	0.0654842662260807	0.9000701513574854	T	T	T
0.9150302533269560	0.0653238272135057	0.9001533428975003	T	T	T
0.1662842760550567	0.2646593834416993	0.9007227559078183	T	T	T
0.4153439918089419	0.2670657138635794	0.9006733579782095	T	T	T
0.6639033170587025	0.2652637353947244	0.9005497932888973	T	T	T
0.9158670437315157	0.2659570966373904	0.8997806369147637	T	T	T
0.1689349692293622	0.4637998361611398	0.9014394485947480	T	T	T
0.4176078401200025	0.4651410944743463	0.9006868064887027	T	T	T
0.6645024087597986	0.4654037130862232	0.9013463130447761	T	T	T
0.9159479996694702	0.4651094762568622	0.9000235294374901	T	T	T
0.1661497100112208	0.6646689117774910	0.8996187240196355	T	T	T
0.4162014528511371	0.6654391779309187	0.8997321810532573	T	T	T
0.6663172866582980	0.6661412812789859	0.8996022422805167	T	T	T
0.9171940829345816	0.6652924296964059	0.8992423748863985	T	T	T
0.1660873266542839	0.8653219865245391	0.8993442940967200	T	T	T
0.4156252566353904	0.8654520069952287	0.8997006864393504	T	T	T
0.6657734365513781	0.8657862814801789	0.9003108729679129	T	T	T
0.9151579840338901	0.8641800041490505	0.8995138013947207	T	T	T
0.9915946054499483	0.9933059035605323	0.9966816031184528	T	T	T
0.2458898704670826	0.9933817727692542	0.9960004519874103	T	T	T
0.4981894897682816	0.9973686030392331	0.9967291617272280	T	T	T
0.7466851948527771	0.9979158233396843	0.9977156782105173	T	T	T
0.9944326376177371	0.1963939626788808	0.9964119395568167	T	T	T
0.2353722699295545	0.1858750429357820	0.0012677350698426	T	T	T
0.4920006897280109	0.1947081654098063	1.0000716840197568	T	T	T
0.7478788769328877	0.1979841505955606	0.9964430691247346	T	T	T
0.9997643243674139	0.3980428988410444	0.9966943451723838	T	T	T
0.2546484546362592	0.3967699288247211	1.0006055238926879	T	T	T
0.5137103712581808	0.4165012113393416	0.0044768187890293	T	T	T
0.7511682434784028	0.3995199983167468	0.9980993059460281	T	T	T
1.0006532086973985	0.5986102072022860	0.9970220196346656	T	T	T
0.2493227381558353	0.5979725953408629	0.99672575756319053	T	T	T
0.5022782877244492	0.6047369917425218	0.9964195517719351	T	T	T
0.7569565422591000	0.6053969337300580	0.9963973746688316	T	T	T
1.0004352532073200	0.7985665114060203	0.9969523337966666	T	T	T
0.2484369932416738	0.7971243607206173	0.9970787317444731	T	T	T
0.4983394291147987	0.7993744019301535	0.9972769755929741	T	T	T

0.7484233898332471	0.7992935987609693	0.9975526901587867	T	T	T
0.3283569704677992	0.3241771132818089	0.0662727794432384	T	T	T
0.4045462678086013	0.2596318988008658	0.0701687953554789	T	T	T
0.4212954575635820	0.2274824560910009	0.1155402334559332	T	T	T
0.2848735047185700	0.3407663238299049	0.1099942224619373	T	T	T
0.5680224821428810	0.3220811254833781	0.0457809001534492	T	T	T

FS: structure97