

Supporting Information

Why Could the Nature of Surface Facets Lead to Differences in the Activity and Stability of Cu₂O-based Electrocatalytic Sensors?

Fabián A.C. Pastroián,¹ Anderson G. M. da Silva,¹ André H.B. Dourado,¹ Ana P. de Lima Batista,¹
Antonio G.S. de Oliveira-Filho,² Jhon Quiroz,¹ Daniela C. de Oliveira,³ Pedro H.C. Camargo,¹
Susana I. Córdoba de Torresi^{1*}

¹*Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo*

Av. Prof. Lineu Prestes, 748, 05508-000, São Paulo, SP, Brazil

²*Departamento de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto,*

Universidade de São Paulo, 14040-901, Ribeirão Preto, SP, Brazil

³*Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais, Laboratório Nacional de Luz Síncrotron,*

Campinas, Brazil

F.A.C.P. and A.G.M.S contributed equally to this article.

*Corresponding author. E-mail: storresi@iq.usp.br

Experimental

Materials and Instrumentation

Analytical grade chemicals copper (II) chloride (CuCl_2 ; 97%, Sigma-Aldrich) and hydroxylamine hydrochloride ($\text{NH}_2\text{OH}\cdot\text{HCl}$, 99%, Sigma-Aldrich), Sodium hydroxide (NaOH , 98.2%, Synth), hydrochloric acid (HCl , 30-33 wt%, Synth), sulfuric acid (H_2SO_4 , 95-98 wt%, Sigma-Aldrich) sodium dodecyl sulfate (SDS, 100%, Sigma-Aldrich), D-(+)-Glucose ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, 99%, Sigma-Aldrich), uric acid ($\text{C}_5\text{H}_4\text{N}_4\text{O}_3$, 99%, Sigma-Aldrich), L-ascorbic acid ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$, 99%, Sigma-Aldrich) were used as received. All aqueous solutions were prepared using deionized water (18.2 M Ω cm).

The scanning electron microscopy (SEM) images were obtained using a JEOL field emission gun microscope JSM 6330F operated at 5 kV. The samples were prepared by drop-casting an aqueous suspension containing the nanostructures over a silicon wafer, followed by drying under ambient conditions. The high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM) images were obtained with a Tecnai FEI G20 microscope operated at 200 kV. Samples for HRTEM, were prepared by drop-casting an aqueous suspension of the materials over a carbon-coated copper grid, followed by drying under ambient conditions. The X-ray diffraction (XRD) data were obtained using a Rigaku-Miniflex II equipment, Cu K α radiation. The diffraction pattern was measured in the range of 30–70° 2 θ with a 1° min⁻¹ angular speed scan. The Cu atomic percentage was measured by flame atomic absorption spectrometry (FAAS) with a Shimadzu spectrophotometer, model AA-6300, equipped with an air-acetylene flame. Textural characteristics for the catalysts were determined from nitrogen adsorption isotherms, recorded

at -196 °C in a Quantachrome Nova 1000. The samples (ca. 40 mg) were degassed for 2 h at 90 °C before analysis under N₂-atmosphere. Specific surface areas were determined by the Brunauer-Emmett-Teller equation (BET method) from adsorption isotherm generated in a relative pressure range $0.07 < P/P_0 < 0.3$. X-ray photoelectron spectra (XPS) were recorded with an SPECSLAB II (Phoibos-Hsa 3500 150, 9 channeltrons) SPECS spectrometer, with Al K α source ($E = 1486.6$ eV) operating at 12 kV, pass energy (E_{pass}) = 40 eV, 0.1 eV energy step and acquisition time of 1 s per point. The residual pressure inside the analysis chamber was $\sim 1 \times 10^{-8}$ Torr. All XPS were referenced according to the adventitious C 1s peak (284.5 eV). Simulation of the experimental photopeaks was carried out using a mixed Gaussian/Lorentzian peak fit procedure according to the software supplied by CasaXPS. Semiquantitative analysis accounted for a nonlinear Shirley background subtraction.

Synthesis of Cu₂O cubes, cuboctahedrons, and octahedrons

Cu₂O crystals were obtained according to a modified previous protocol.¹ Typically for the synthesis of Cu₂O cubes, cuboctahedrons, and octahedrons, 9.4, 9.0, and 8.8 mL of water were respectively added to three different 10 mL round-bottom flask connected to a septum-inlet Flask labeled A, B, and C, respectively. Then 0.1 mL of 0.1 molL⁻¹ CuCl₂ solution and 0.01 g of SDS powder were added to each flask with vigorous stirring until dissolution of the powder until becoming a suspension (~5 min). In the next step, 0.25, 0.45, and 0.85 mL of 0.2 molL⁻¹ NH₂OH·HCl were added to bottles A, B, and C, respectively. After 10 s, 0.25 mL of 1.0 molL⁻¹ NaOH was added, and the suspension were stirred shaken for 2 h. The total solution volume in each bottle is 10 mL. The suspension color turned from light blue to yellow after few seconds

within the addition of NaOH. The products were collected by centrifugation and washed three times with ethanol (10 mL) and three times with water (10 mL) by successive rounds of centrifugation and removal of the supernatant and then, suspended in 1 mL of water. The Cu₂O content in the suspensions as determined by FAAS analysis was similar for all shapes, corresponding to 694, 712, and 747 mg/L for Cu₂O cubes, cuboctahedrons, and octahedrons materials, respectively. The Cu₂O cuboctahedrons, and octahedrons were normalized in volume by 1.07- and 1.02-folds in order to provide the same concentration for the Cu₂O crystals suspensions.

Electrocatalytic detection of Glucose

Cyclic voltammetry (CV) and chronoamperometric (CA) experiments were performed in a 10 mL cell containing 5 mL of a 0.1 mol.L⁻¹ NaOH connected to an Autolab PGSTAT 30 (Eco Chemie) potentiostat/galvanostat. All potentials were referred to a Ag/AgCl/ KCl_{sat} electrode, while a platinum foil was employed as the counter electrode and a glassy carbon electrode (GCE) (3 mm diameter) was used as the working electrode. Before the experiments, the GCE was polished with successive slurries of 1, 0.3, and 0.05 μm alumina and sonicated for 3 min in a ~1.2 mol.L⁻¹ HCl solution. To remove polishing contaminants, the GCE was electrochemically treated by cyclic voltammetry (CV) in a 2 mol.L⁻¹ H₂SO₄ solution from -1.0 V to 0.2 V at a scan rate (v) of 50mVs⁻¹ and then it was washed with deionized water. Cu₂O samples for electrochemical measurements were prepared by drop-casting an aqueous 5 μL of each Cu₂O shape at the same concentration over the GCE, followed by drying under ambient conditions in a compact Vacuum Drying Oven Heraeus Vacutherm VT 6025. The glucose sensing was carried

out by chronoamperometric experiments ($E = 0.5V$) by adding 5 μL of glucose ($0.1-2 \text{ mmol.L}^{-1}$) in time intervals of 50 s for 400 s. Finally, the same set up was used to investigate the selectivity of Cu_2O crystals by adding 5 μL of 0.01 mmol.L^{-1} ascorbic acid or uric acid every 50 s up to 400 s.

In situ Fourier-transform infrared spectroscopy-coupled spectroelectrochemistry experiments

A Thermo-Nicolet 6700 FT-IR spectrometer (gain 8, 1.8988 optical velocity, 4 cm^{-1} resolution, 350 accumulations, 255 s per measurement) coupled with an Autolab potentiostat/galvanostat (AUT85732) was used for the spectroelectrochemical experiments using a thin layer electrochemical cell with a ZnSe window. The pathlength (b) was estimated according the Equation 1:

$$b = n / (2\Delta\nu) \quad (1)$$

where, n is the number of fringes and $\Delta\nu$ the wavelength range, in which all values for absorbance were normalized by $\Delta\nu$. In addition, while a Au disk (5 mm radius) was employed as the reflecting working electrode using the same procedure employed for GCE, a Au foil and a $\text{Ag}|\text{AgCl}$ (KCl_{sat}) were used as the auxiliary and the reference electrodes, respectively. The working electrode was polished using alumina (3 and 0.5 μm). The cell was cleaned in piranha solution (4 : 1 v/v H_2SO_4 : H_2O_2) 20 hours before the measurements.

Theoretical Methodology

A theoretical investigation based on density functional theory (DFT) was performed. The PBE+D3(BJ)/def2-SVP level of theory was employed throughout this work.²⁻¹² The surface facets were represented by their stoichiometric clusters with O-terminated (111) surfaces and Cu-terminated (100) surfaces, the most stable terminations under oxygen-lean conditions.¹³ All calculations were carried out using the ORCA program package (version 4.0.0.2).^{14,15} Both surface models were modeled by a rigid cluster of 213 atoms, which were built using the lattice parameter for the cubic cuprite unit cell ($a = 4.2696 \text{ \AA}$) and the Wulff constructor of the Virtual NanoLab.¹⁶ The atomic positions in the cluster were kept frozen at the corresponding bulk positions so that the effect of surface reconstruction/relaxation should not lead to significant differences in the overall trend. The use of molecular models with a finite number of atoms is an usual procedure to study chemical processes on solid surfaces allowing the description of local electronic properties.¹⁷⁻²² Oxygen, glucose, urate, and ascorbate geometries were optimized and the frozen equilibrium coordinates were used to build the potential energy curves for the interaction between these molecules and the Cu_2O clusters. An extensive set of cartesian coordinates for all structures, along with their total electronic energies, were added at the end of this file in xyz format.

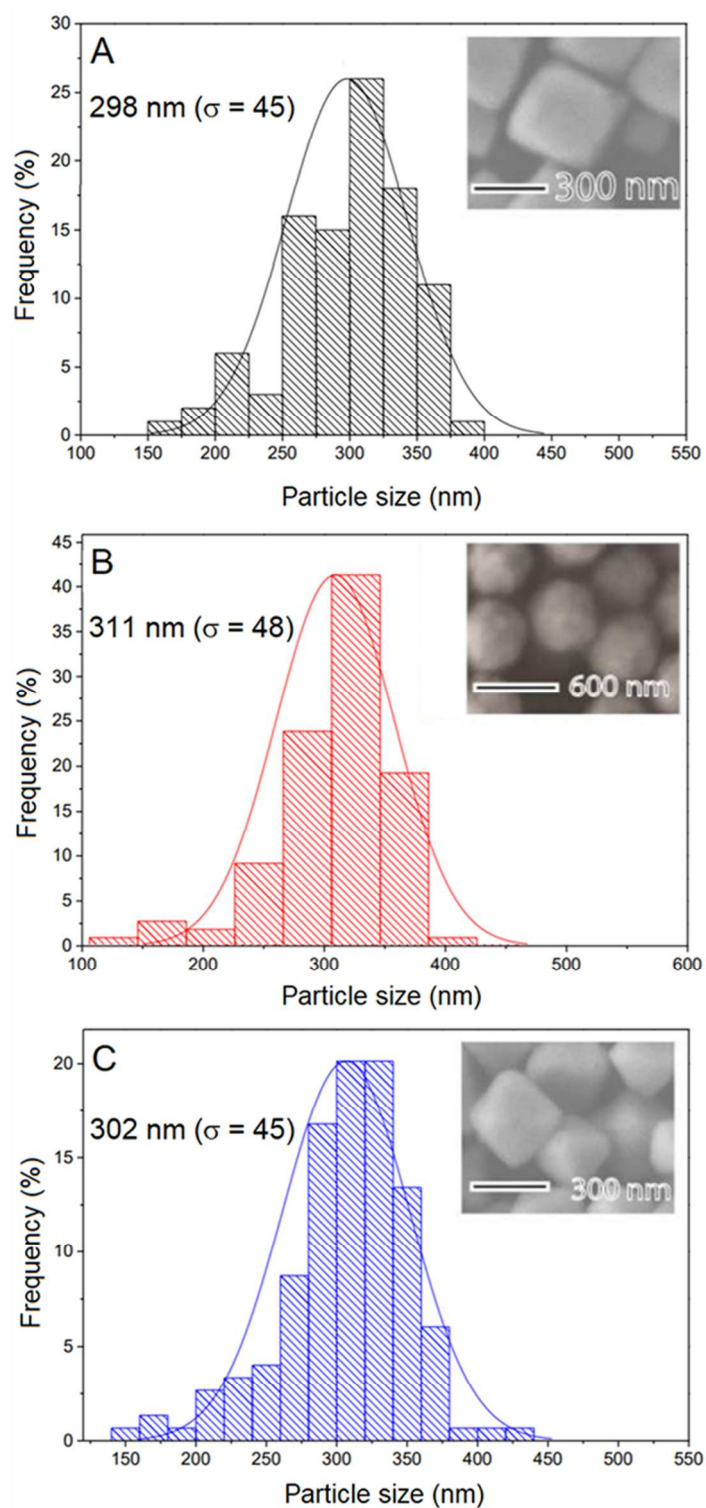


Figure S1. Histograms of particle size distributions for Cu_2O cubes (A), cuboctahedrons (B), and octahedrons (C) that are shown in Figure 2.

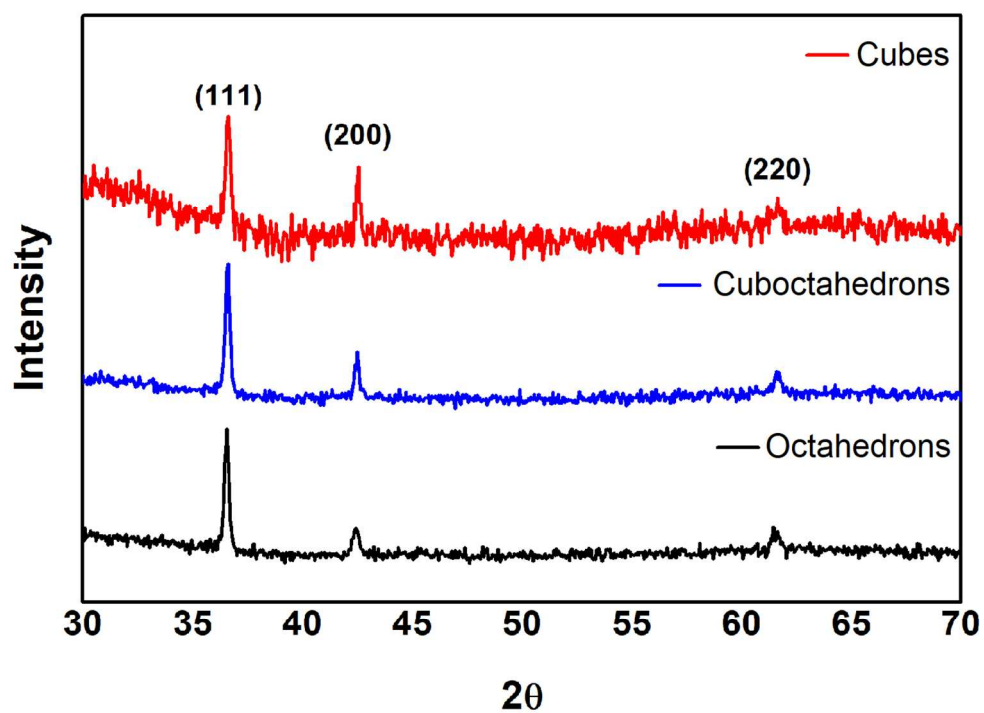


Figure S2. X-ray diffraction (XRD) patterns for Cu₂O cubes, cuboctahedrons, and octahedrons.

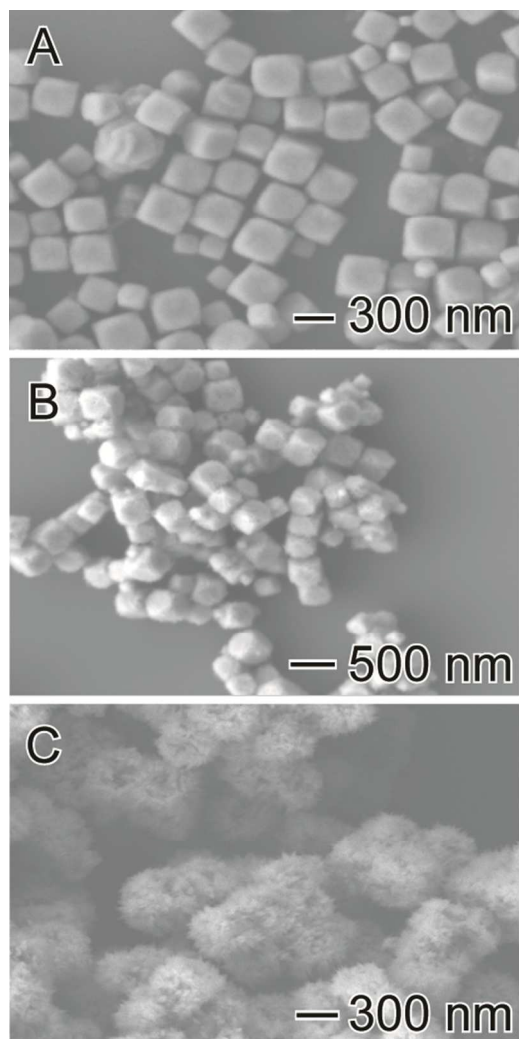


Figure S3. (A-C) SEM images of Cu₂O cubes at the first day of synthesis (A) and their morphological evolution as function of time for the same sample after several days in aqueous solution: (B) 7th day and (C) 14th day.

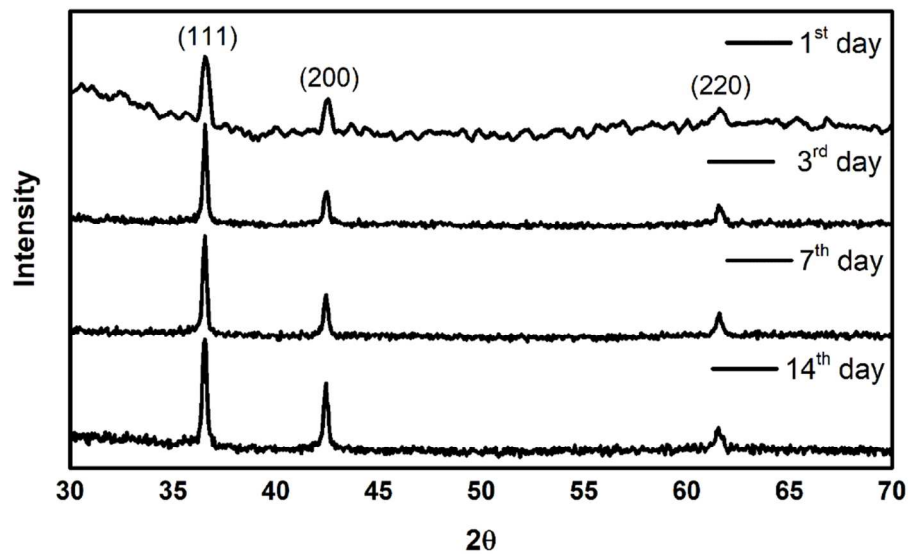


Figure S4. XRD patterns as function of time for the Cu_2O cubes at the first day of synthesis and the same sample after several days in aqueous solution.

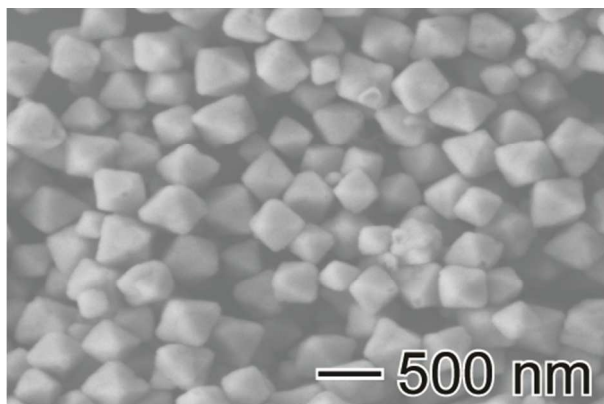


Figure S5. SEM image of Cu₂O octahedrons at 14th day after their synthesis.

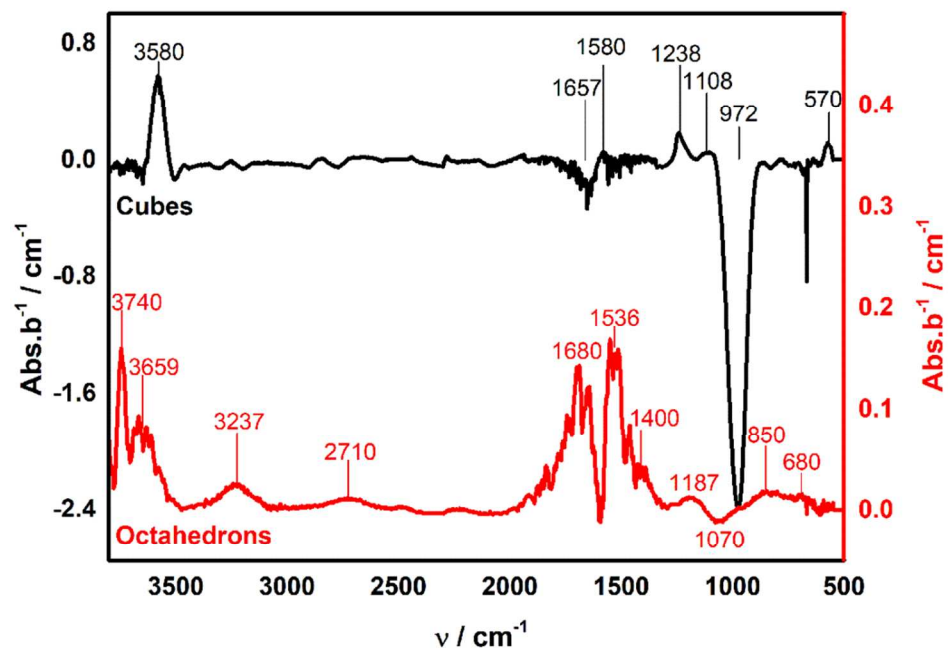


Figure S6. *In situ* IRRA spectra for Cu₂O cubes (black line) and octahedrons (red line) in the presence of glucose at potential of 0.50 V.

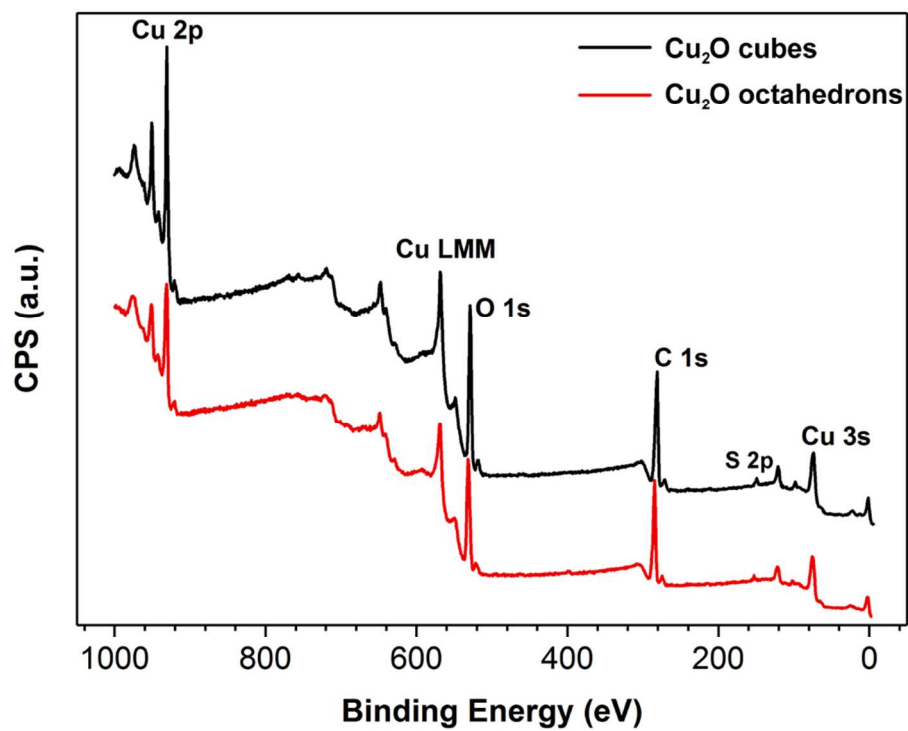


Figure S7. XPS spectra for Cu₂O cubes (black line) and octahedrons (red line).

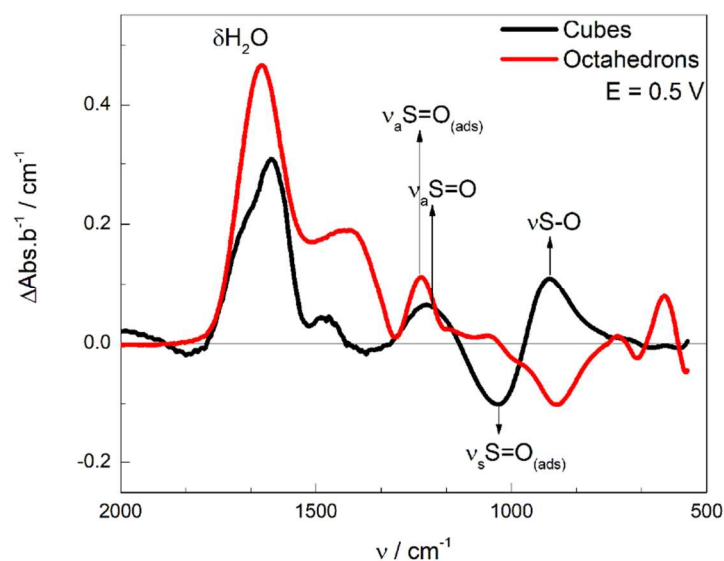


Figure S8. *In situ* IRRA spectra Cu₂O Cubes (solid black line) and octahedrons (red line) at the *j*/*E* peak potential. The spectra present information concerning the adsorption/desorption processes of SDS. The enhanced desorption of the SDS at the Cu₂O cubes surface can be explained by several evidences: (i) the ωCH_2 for the Cu₂O cubes (1420 cm⁻¹) leads to a much less intense band relative to octahedrons, (ii) the band corresponding to $\nu_a\text{S}=\text{O}$ is observed at 1210 cm⁻¹, region related to SDS free in the solution.²³ The negative band in the region of $\nu_s\text{S}=\text{O}_{(\text{ads})}$ (1040 cm⁻¹) and the positive band related to $\nu\text{S}-\text{O}$ (910 cm⁻¹) are additional evidences of the desorption of the capping agent. This persistence was verified by the very intense ωCH_2 band, evidencing high interfacial (iii) the band related to $\nu_a\text{S}=\text{O}$ observed at 1230 cm⁻¹, was shifted 20 cm⁻¹ and sharpened as compared to the cubes, coherent with a molecule with limited mobility, suggesting that the SDS still adsorbed on the octahedron particles. This shift to more energetic wavenumbers is coherent to adsorbed SDS.²³ The shoulder at 1040 cm⁻¹ is also coherent with adsorbed SDS, since this region is related to $\nu_s\text{S}=\text{O}_{(\text{ads})}$,²³ region of negative absorbance for the cubic structures. Therefore, these results also in agreement with DFT, XPS, and catalytic results. It is also important to note that the experiment using the Cu₂O cubes was also performed in the same potential relative to the oxidation peak is observed in their *j*/*E* profile. The evidence of desorption of SDS during the oxidation peak is a strong evidence that this oxidation occurs in higher extension for this form. Similar behaviours were also reported single crystal metallic electrodes in presence of sulphate.^{24,25}

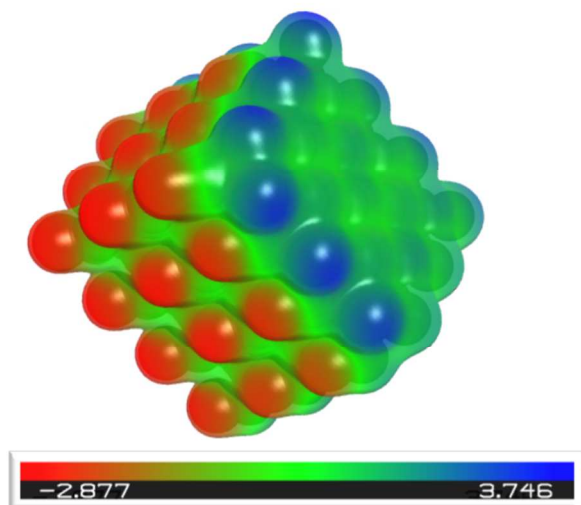


Figure S9. Electrostatic potential maps generated by DFT method for a single Cu₂O cube. The red region corresponds to a negative electrostatic potential, whereas the blue color corresponds to the positive potential. The values are in eV.

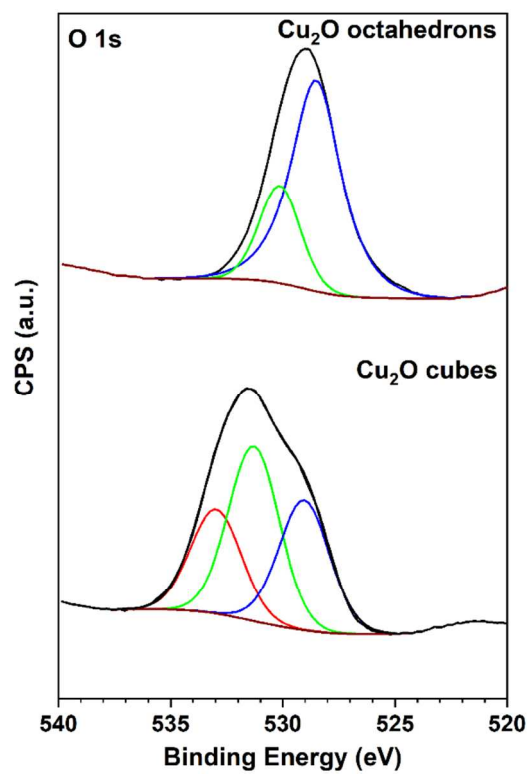


Figure S10. Deconvoluted O 1s spectra for Cu₂O cubes and octahedron.

Table S1. XPS binding energies and O_s/O_L ratio obtained from the O 1s regions for Cu_2O cubes and octahedrons.

Sample	Binding energy O 1s (eV)		O_s/O_L
	O_L	O_s	
Cu_2O cubes	529.2 (26)*	531.3 (54)*	2.1
Cu_2O octahedrons	528.9 (86)*	531.1 (14)*	0.2

*percentages of O species.

References

- (1) Kuo, C.-H.; Huang, M. H. Facile Synthesis of Cu₂O Nanocrystals with Systematic Shape Evolution from Cubic to Octahedral Structures. *J. Phys. Chem. C* **2008**, *112*, 18355–18360.
- (2) Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *77*, 3865–3868.
- (3) Eichkorn, K.; Treutler, O.; Öhm, H.; Häser, M.; Ahlrichs, R. Auxiliary basis sets to approximate Coulomb potentials. *Chem. Phys. Lett.* **1995**, *240*, 283–290.
- (4) Kendall, R. A.; Früchtel, H. A. The impact of the resolution of the identity approximate integral method on modern ab initio algorithm development. *Theor. Chem. Acc.* **1997**, *97*, 158–163.
- (5) Use of approximate integrals in ab initio theory. An application in MP2 energy calculations. *Chem. Phys. Lett.* **1993**, *208*, 359–363.
- (6) Schäfer, A.; Horn, H.; Ahlrichs, R. Fully optimized contracted Gaussian basis sets for atoms Li to Kr. *J. Chem. Phys.* **1992**, *97*, 2571–2577.
- (7) Aoto, Y. A.; de Lima Batista, A. P.; Köhn, A.; de Oliveira-Filho, A. G. S. How to arrive at accurate benchmark values for transition metal compounds: Computation or experiment? *J. Chem. Theory Comput.* **2017**, *13*, 5291–5316.
- (8) Grimme, S. Density functional theory with London dispersion corrections. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2011**, *1*, 211–228.
- (9) Grimme, S.; Antony, J.; Ehrlich, S.; Krieg, H. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H–Pu. *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 154104.
- (10) Grimme, S.; Ehrlich, S.; Goerigk, L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. *J. Comput. Chem.* **2011**, *32*, 1456–1465.
- (11) Weigend, F.; Ahlrichs, R. Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for H to Rn: Design and assessment of accuracy. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2005**, *7*, 3297–3305.
- (12) Andrae, D.; Häussermann, U.; Dolg, M.; Stoll, H.; Preuss, H. Energy-adjusted ab initio pseudopotentials for the second and third row transition elements. *Theor. Chim. Acta* **1990**, *77*, 123–141.
- (13) Stenlid, J. H.; Johansson, A. J.; Leygraf, C.; Brinck, T. Computational analysis of the early stage of cuprous oxide sulphidation: a top-down process. *Corr. Eng. Sci. Techn.* **2017**, *52*, 50–53.
- (14) Neese, F. The ORCA program system. *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **2012**, *2*, 73–78.
- (15) Neese, F. Software update: the ORCA program system, version 4.0. *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **2017**, e1327.
- (16) Virtual NanoLab version 2016.4, QuantumWise A/S (www.quantumwise.com). QuantumWise A/S 2016.

- (17) Stodt, D.; Noei, H.; Hättig, C.; Wang, Y. A combined experimental and computational study on the adsorption and reactions of NO on rutile TiO₂. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, *15*, 466–472.
- (18) Kubas, A.; Berger, D.; Oberhofer, H.; Maganas, D.; Reuter, K.; Neese, F. Surface Adsorption Energetics Studied with “Gold Standard” Wave-Function-Based Ab Initio Methods: Small-Molecule Binding to TiO₂(110). *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, *7*, 4207–4212.
- (19) Boese, A. D.; Sauer, J. Accurate adsorption energies of small molecules on oxide surfaces: CO–MgO(001). *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, *15*, 16481–16493.
- (20) de Lima Batista, A. P.; Zahariev, F.; Slowing, I. I.; Braga, A. A. C.; Ornellas, F. R.; Gordon, M. S. Silanol-Assisted Carbinolamine Formation in an Amine-Functionalized Mesoporous Silica Surface: Theoretical Investigation by Fragmentation Methods. *J. Phys. Chem. B* **2016**, *120*, 1660–1669.
- (21) Dourado, A. H. B.; de Lima Batista, A. P.; Oliveira-Filho, A. G. S.; Sumodjo, P. T. A.; Cordoba de Torresi, S. I. I -Cysteine electrooxidation in alkaline and acidic media: a combined spectroelectrochemical and computational study. *RSC Adv.* **2017**, *7*, 7492–7501.
- (22) de Lima Batista, A. P.; Ornellas, F. R. CASSCF and MRMP2 investigation of the interaction of arsenic adatoms with carbon dimers on the diamond (100)-2 × 1 surface. *Surf. Sci.* **2015**, *641*, 159–165.
- (23) Li, H.; Tripp, C. P. Use of Infrared Bands of the Surfactant Headgroup to Identify Mixed Surfactant Structures Adsorbed on Titania. *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 18318–18326.
- (24) Climent, V.; Feliu, J. M. Surface Electrochemistry with Pt Single-Crystal Electrodes. In *Advances in Electrochemical Science and Engineering: Nanopatterned and Nanoparticle-Modified Electrodes*; John Wiley & Sons, 2017; pp 1–57.
- (25) Álvarez-Ruiz, B.; Gómez, R.; Orts, J. M.; Feliu, J. M. Role of the metal and surface structure in the electro-oxidation of hydrazine in acidic media. *J. Electrochem. Soc.* **2002**, *149*, D35.

Cartesian coordinates for the calculated potential energy profile for the adsorption of glucose at the surface of Cu₂O cube (Cu₂O (100))

213

-212068.849666322611

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400

O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	-0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	-0.000000	10.674000	2.134800
Cu	-0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	-0.000000	10.674000	6.404400
Cu	-0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	-0.000000	10.674000	10.674000
Cu	-0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600

Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	-0.000000
Cu	2.134800	10.674000	-0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	-0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	-0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200

Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	-0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	-0.000000
Cu	6.404400	6.404400	-0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	-0.000000
Cu	6.404400	10.674000	-0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800

Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	11.919700	3.767100	5.637200
H	12.754000	3.647200	4.903600
O	11.640100	5.179600	5.675100
H	12.483600	6.007500	7.385600
C	11.477200	5.786200	6.957400
C	10.696000	4.893200	7.925700
H	9.709300	4.696600	7.436900
O	10.543600	5.537600	9.171700
H	10.195500	6.425400	8.955500
C	11.376600	3.535300	8.129200
H	11.974200	3.610600	9.066300
O	10.356300	2.553300	8.220200
H	10.762200	1.738100	8.566700
C	10.689000	3.059400	5.047100
H	10.958200	2.016200	4.774400
H	9.889400	2.994100	5.823200
O	10.268200	3.722700	3.877600
H	10.273800	4.670400	4.129200
C	12.382700	3.229500	6.992400
H	12.464800	2.116200	6.906200
O	13.620800	3.810200	7.385300
H	14.197000	3.834400	6.599100
O	10.717000	6.950800	6.802200
H	11.286500	7.629200	6.396900

213

-212068.883962525928

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000

Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600

O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400

Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000

Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	12.167200	3.758000	5.635000
H	13.001500	3.638100	4.901400
O	11.887600	5.170500	5.672900
H	12.731100	5.998400	7.383400
C	11.724700	5.777100	6.955200
C	10.943500	4.884100	7.923500
H	9.956800	4.687500	7.434700
O	10.791100	5.528500	9.169500
H	10.443000	6.416300	8.953300
C	11.624100	3.526200	8.127000
H	12.221700	3.601500	9.064100
O	10.603800	2.544200	8.218000
H	11.009700	1.729000	8.564500
C	10.936500	3.050300	5.044900
H	11.205700	2.007100	4.772200
H	10.136900	2.985000	5.821000
O	10.515700	3.713600	3.875400

H	10.521300	4.661300	4.127000
C	12.630200	3.220400	6.990200
H	12.712300	2.107100	6.904000
O	13.868300	3.801100	7.383100
H	14.444500	3.825300	6.596900
O	10.964500	6.941700	6.800000
H	11.534000	7.620100	6.394700

213

-212068.888045823318

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000

Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400

O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400

Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600

O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	12.249700	3.755000	5.634300
H	13.084000	3.635100	4.900700
O	11.970100	5.167500	5.672200
H	12.813600	5.995400	7.382700
C	11.807200	5.774100	6.954500
C	11.026000	4.881100	7.922800
H	10.039300	4.684500	7.434000
O	10.873600	5.525500	9.168800
H	10.525500	6.413300	8.952600
C	11.706600	3.523200	8.126300
H	12.304200	3.598500	9.063400
O	10.686300	2.541200	8.217300
H	11.092200	1.726000	8.563800
C	11.019000	3.047300	5.044200
H	11.288200	2.004100	4.771500
H	10.219400	2.982000	5.820300
O	10.598200	3.710600	3.874700
H	10.603800	4.658300	4.126300
C	12.712700	3.217400	6.989500
H	12.794800	2.104100	6.903300
O	13.950800	3.798100	7.382400
H	14.527000	3.822300	6.596200
O	11.047000	6.938700	6.799300
H	11.616500	7.617100	6.394000

213

-212068.889078690932

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800

O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000

Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200

Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800

Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	12.332200	3.752000	5.633600
H	13.166500	3.632100	4.900000
O	12.052600	5.164500	5.671500
H	12.896100	5.992400	7.382000
C	11.889700	5.771100	6.953800
C	11.108500	4.878100	7.922100
H	10.121800	4.681500	7.433300
O	10.956100	5.522500	9.168100
H	10.608000	6.410300	8.951900
C	11.789100	3.520200	8.125600
H	12.386700	3.595500	9.062700
O	10.768800	2.538200	8.216600
H	11.174700	1.723000	8.563100
C	11.101500	3.044300	5.043500
H	11.370700	2.001100	4.770800
H	10.301900	2.979000	5.819600
O	10.680700	3.707600	3.874000
H	10.686300	4.655300	4.125600
C	12.795200	3.214400	6.988800

H	12.877300	2.101100	6.902600
O	14.033300	3.795100	7.381700
H	14.609500	3.819300	6.595500
O	11.129500	6.935700	6.798600
H	11.699000	7.614100	6.393300

213

-212068.889552461857

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800

Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400

Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200

O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200

O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	12.414800	3.749000	5.632900
H	13.249100	3.629000	4.899300
O	12.135200	5.161400	5.670800
H	12.978700	5.989300	7.381300
C	11.972200	5.768000	6.953100
C	11.191100	4.875100	7.921400
H	10.204400	4.678500	7.432600
O	11.038700	5.519400	9.167400
H	10.690600	6.407200	8.951100
C	11.871700	3.517100	8.124900
H	12.469300	3.592400	9.062000
O	10.851400	2.535100	8.215900
H	11.257300	1.719900	8.562400
C	11.184100	3.041200	5.042800
H	11.453300	1.998000	4.770100
H	10.384500	2.976000	5.818900
O	10.763300	3.704500	3.873300
H	10.768900	4.652200	4.124900
C	12.877800	3.211300	6.988100
H	12.959900	2.098000	6.901900
O	14.115900	3.792000	7.380900
H	14.692100	3.816200	6.594800
O	11.212100	6.932700	6.797900
H	11.781600	7.611000	6.392600

213

-212068.888727530837

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000

Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800

Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000

O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600

O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	12.497300	3.745900	5.632100
H	13.331600	3.626000	4.898500
O	12.217700	5.158400	5.670000
H	13.061200	5.986300	7.380500
C	12.054800	5.765000	6.952300
C	11.273600	4.872000	7.920600
H	10.286900	4.675400	7.431800
O	11.121200	5.516400	9.166600
H	10.773100	6.404200	8.950400
C	11.954200	3.514100	8.124100
H	12.551800	3.589400	9.061200
O	10.933900	2.532100	8.215100
H	11.339800	1.716900	8.561600
C	11.266600	3.038200	5.042000
H	11.535800	1.995000	4.769300
H	10.467000	2.972900	5.818100
O	10.845800	3.701500	3.872500
H	10.851400	4.649200	4.124100
C	12.960300	3.208300	6.987300
H	13.042400	2.095000	6.901100
O	14.198400	3.789000	7.380200

H	14.774600	3.813200	6.594000
O	11.294600	6.929600	6.797100
H	11.864100	7.608000	6.391800

213

-212068.879719671502

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600

Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200

Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000

Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000

O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	12.827300	3.733900	5.629300
H	13.661600	3.614000	4.895600
O	12.547700	5.146300	5.667200
H	13.391200	5.974200	7.377700
C	12.384800	5.752900	6.949500
C	11.603600	4.860000	7.917800
H	10.616900	4.663400	7.429000
O	11.451200	5.504300	9.163700
H	11.103100	6.392100	8.947500
C	12.284200	3.502000	8.121300
H	12.881800	3.577400	9.058300
O	11.263900	2.520100	8.212200
H	11.669800	1.704800	8.558800
C	11.596600	3.026100	5.039200
H	11.865800	1.982900	4.766400
H	10.797000	2.960900	5.815300
O	11.175800	3.689500	3.869600
H	11.181400	4.637100	4.121300
C	13.290300	3.196200	6.984500
H	13.372400	2.083000	6.898200
O	14.528400	3.776900	7.377300
H	15.104600	3.801100	6.591200
O	11.624600	6.917600	6.794300
H	12.194100	7.596000	6.389000

213

-212068.865547349531

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800

Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600

Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000

Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200

Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	13.239800	3.718800	5.625600
H	14.074100	3.598900	4.892000
O	12.960200	5.131300	5.663500
H	13.803700	5.959200	7.374000
C	12.797300	5.737900	6.945800
C	12.016100	4.844900	7.914100
H	11.029400	4.648300	7.425300
O	11.863700	5.489300	9.160100
H	11.515600	6.377100	8.943900
C	12.696700	3.487000	8.117600
H	13.294300	3.562300	9.054700
O	11.676400	2.505000	8.208600
H	12.082300	1.689800	8.555100
C	12.009100	3.011100	5.035500
H	12.278300	1.967900	4.762800
H	11.209500	2.945800	5.811600
O	11.588300	3.674400	3.866000
H	11.593900	4.622100	4.117600
C	13.702800	3.181200	6.980800
H	13.784900	2.067900	6.894600
O	14.940900	3.761900	7.373700
H	15.517100	3.786100	6.587500
O	12.037100	6.902500	6.790600

H	12.606600	7.580900	6.385300
213			
-212068.855780498561			
Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400

O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000

O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800

Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200

C	13.569800	3.706700	5.622700
H	14.404100	3.586800	4.889100
O	13.290200	5.119200	5.660600
H	14.133700	5.947100	7.371100
C	13.127300	5.725800	6.942900
C	12.346100	4.832800	7.911200
H	11.359400	4.636200	7.422400
O	12.193700	5.477200	9.157200
H	11.845600	6.365000	8.941000
C	13.026700	3.474900	8.114700
H	13.624300	3.550200	9.051800
O	12.006400	2.492900	8.205700
H	12.412300	1.677700	8.552200
C	12.339100	2.999000	5.032600
H	12.608300	1.955800	4.759900
H	11.539500	2.933700	5.808700
O	11.918300	3.662300	3.863100
H	11.923900	4.610000	4.114700
C	14.032800	3.169100	6.977900
H	14.114900	2.055800	6.891700
O	15.270900	3.749800	7.370800
H	15.847100	3.774000	6.584600
O	12.367100	6.890400	6.787700
H	12.936600	7.568800	6.382400

213

-212068.846817896701

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600

Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200

Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800

Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000

Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	13.899900	3.694600	5.619800
H	14.734200	3.574700	4.886200
O	13.620300	5.107100	5.657700
H	14.463800	5.935000	7.368200
C	13.457400	5.713700	6.940000
C	12.676200	4.820700	7.908300
H	11.689500	4.624100	7.419500
O	12.523800	5.465100	9.154300
H	12.175700	6.352900	8.938100
C	13.356800	3.462800	8.111800
H	13.954400	3.538100	9.048900
O	12.336500	2.480800	8.202800
H	12.742400	1.665600	8.549300
C	12.669200	2.986900	5.029700
H	12.938400	1.943700	4.757000
H	11.869600	2.921600	5.805800
O	12.248400	3.650200	3.860200
H	12.254000	4.597900	4.111800
C	14.362900	3.157000	6.975000
H	14.445000	2.043700	6.888800
O	15.601000	3.737700	7.367900
H	16.177200	3.761900	6.581700
O	12.697200	6.878300	6.784800
H	13.266700	7.556700	6.379500

-212068.838968355791

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400

Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000

Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400

Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	14.229900	3.682500	5.616900
H	15.064200	3.562600	4.883300

O	13.950300	5.095000	5.654800
H	14.793800	5.922900	7.365300
C	13.787400	5.701600	6.937100
C	13.006200	4.808600	7.905400
H	12.019500	4.612000	7.416600
O	12.853800	5.453000	9.151400
H	12.505700	6.340800	8.935200
C	13.686800	3.450700	8.108900
H	14.284400	3.526000	9.046000
O	12.666500	2.468800	8.199900
H	13.072400	1.653500	8.546400
C	12.999200	2.974800	5.026800
H	13.268400	1.931600	4.754100
H	12.199600	2.909500	5.802900
O	12.578400	3.638100	3.857300
H	12.584000	4.585800	4.108900
C	14.692900	3.144900	6.972100
H	14.775000	2.031600	6.885900
O	15.931000	3.725600	7.365000
H	16.507200	3.749800	6.578800
O	13.027200	6.866200	6.781900
H	13.596700	7.544600	6.376600

213

-212068.820618358965

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400

O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400

Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600

O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800

Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	15.550000	3.634200	5.605400
H	16.384300	3.514300	4.871800
O	15.270400	5.046700	5.643300
H	16.113900	5.874600	7.353800
C	15.107500	5.653300	6.925600
C	14.326300	4.760300	7.893900
H	13.339600	4.563700	7.405100
O	14.173900	5.404700	9.139900
H	13.825800	6.292500	8.923700
C	15.006900	3.402400	8.097400
H	15.604500	3.477700	9.034500
O	13.986600	2.420400	8.188400
H	14.392500	1.605200	8.534900
C	14.319300	2.926500	5.015300
H	14.588500	1.883300	4.742600
H	13.519700	2.861200	5.791400
O	13.898500	3.589800	3.845800
H	13.904100	4.537500	4.097400
C	16.013000	3.096600	6.960600
H	16.095100	1.983300	6.874400
O	17.251100	3.677300	7.353500
H	17.827300	3.701500	6.567300
O	14.347300	6.817900	6.770400
H	14.916800	7.496300	6.365100

213

-212068.815057554370

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
----	----------	----------	----------

Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200

Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800

Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000

Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	17.270700	3.527900	5.608300
H	18.105000	3.407900	4.874700
O	16.991100	4.940400	5.646200
H	17.834600	5.768200	7.356700

C	16.828200	5.546900	6.928500
C	16.047000	4.653900	7.896800
H	15.060300	4.457300	7.408000
O	15.894600	5.298300	9.142800
H	15.546500	6.186200	8.926600
C	16.727600	3.296100	8.100300
H	17.325200	3.371300	9.037400
O	15.707300	2.314100	8.191300
H	16.113200	1.498800	8.537800
C	16.040000	2.820100	5.018200
H	16.309200	1.777000	4.745500
H	15.240400	2.754800	5.794300
O	15.619200	3.483400	3.848700
H	15.624800	4.431100	4.100300
C	17.733700	2.990300	6.963500
H	17.815800	1.877000	6.877300
O	18.971800	3.571000	7.356400
H	19.548000	3.595100	6.570200
O	16.068000	6.711500	6.773300
H	16.637500	7.389900	6.368000

213

-212068.813973912649

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400

Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200

O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200

O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600

O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
C	19.651400	3.397300	5.605400
H	20.485700	3.277400	4.871800
O	19.371800	4.809800	5.643300
H	20.215300	5.637700	7.353800
C	19.208900	5.416400	6.925600
C	18.427700	4.523400	7.893900
H	17.441000	4.326800	7.405100
O	18.275300	5.167800	9.139900
H	17.927200	6.055600	8.923700
C	19.108300	3.165500	8.097400
H	19.705900	3.240800	9.034500
O	18.088000	2.183500	8.188400
H	18.493900	1.368300	8.534900
C	18.420700	2.689600	5.015300
H	18.689900	1.646400	4.742600
H	17.621100	2.624300	5.791400
O	17.999900	3.352900	3.845800
H	18.005500	4.300600	4.097400
C	20.114400	2.859700	6.960600
H	20.196500	1.746400	6.874400
O	21.352500	3.440400	7.353500
H	21.928700	3.464600	6.567300
O	18.448700	6.581000	6.770400
H	19.018200	7.259400	6.365100

Cartesian coordinates for the calculated potential energy profile for the adsorption of glucose at the surface of Cu₂O octahedron (Cu₂O (111)).

```

213
-212070.718290625809
Cu  0.000000  0.000000  0.000000
Cu  0.000000  4.269600  0.000000
Cu  0.000000  2.134800  2.134800
Cu -2.134800  4.269600  2.134800
O  -1.067400  3.202200  1.067400
Cu  0.000000  4.269600  4.269600
Cu  0.000000  6.404400  2.134800
Cu  4.269600 -4.269600  0.000000
Cu  4.269600  0.000000 -4.269600
Cu  4.271500 -2.134800 -2.136700
Cu  2.137500 -0.001100 -2.138100
O   3.103800 -1.236100 -3.304300
Cu  2.134800 -2.134800  0.000000
Cu  4.269600  0.000000  0.000000
Cu  4.269600 -2.134800  2.134800
Cu  2.134800  0.000000  2.134800
O   3.202200 -1.067400  1.067400
Cu  4.269600  0.000000  4.269600
Cu  4.269600  4.269600 -4.269600
Cu  4.270400  2.134800 -2.135600
Cu  2.135300  4.268500 -2.135900
O   3.202900  3.202200 -3.202900
Cu  2.134800  2.134800  0.000000
Cu  4.269600  4.269600  0.000000
Cu  4.269600  2.134800  2.134800
Cu  2.134800  4.269600  2.134800
O   1.067400  1.067400 -1.067400
O   3.202200  3.202200  1.067400
Cu  2.134800  2.134800  4.269600
Cu  4.269600  4.269600  4.269600
Cu  4.269600  2.134800  6.404400
Cu  2.134800  4.269600  6.404400
O   1.067400  1.067400  3.202200
O   3.202200  3.202200  5.337000
Cu  4.269600  4.269600  8.539200
Cu  4.269300  6.404400 -2.134500
Cu  2.134800  6.404400  0.000000
Cu  4.269600  8.539200  0.000000
Cu  4.269600  6.404400  2.134800
Cu  2.134800  8.539200  2.134800
O   1.067400  5.337000 -1.067400
O   3.202200  7.471800  1.067400
Cu  2.134800  6.404400  4.269600

```

Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400

O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200

Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800

O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	16.413500	9.570900	-3.348800
H	17.054300	9.713400	-2.444400
O	15.202300	10.303600	-3.082000
H	13.699000	8.979200	-2.526700
C	13.962500	9.657800	-3.372400
C	14.019500	8.852600	-4.673800
H	14.300200	9.580500	-5.475300
O	12.770900	8.247300	-4.930500
H	12.118100	8.970200	-4.845200
C	15.113000	7.779500	-4.636500
H	14.617300	6.822900	-4.353200
O	15.699000	7.719100	-5.927500
H	16.228700	6.902500	-5.972600
C	17.127800	10.254700	-4.525800
H	18.169900	9.875000	-4.596500
H	16.618700	9.980100	-5.480400
O	17.182500	11.646000	-4.311500
H	16.272900	11.876900	-4.027700
C	16.158600	8.073800	-3.532900
H	17.123200	7.601400	-3.848600
O	15.659600	7.481800	-2.339200
H	16.172900	7.844900	-1.593800
O	12.986200	10.641600	-3.565600
H	12.753000	11.008500	-2.693800

213

-212070.728033625754

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600

Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400

O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200

O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700

Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	17.083200	10.116500	-3.936000
H	17.724000	10.259000	-3.031600
O	15.872000	10.849200	-3.669200
H	14.368700	9.524800	-3.113900
C	14.632200	10.203400	-3.959600
C	14.689200	9.398200	-5.261000
H	14.969900	10.126100	-6.062500
O	13.440600	8.792900	-5.517700
H	12.787800	9.515800	-5.432400
C	15.782700	8.325100	-5.223700
H	15.287000	7.368500	-4.940400
O	16.368700	8.264700	-6.514700
H	16.898400	7.448100	-6.559800
C	17.797500	10.800300	-5.113000
H	18.839600	10.420600	-5.183700
H	17.288400	10.525700	-6.067600
O	17.852200	12.191600	-4.898700
H	16.942600	12.422500	-4.614900
C	16.828300	8.619400	-4.120100
H	17.792900	8.147000	-4.435800
O	16.329300	8.027400	-2.926400
H	16.842600	8.390500	-2.181000
O	13.655900	11.187200	-4.152800

H	13.422700	11.554100	-3.281000
213			
-212070.715716630773			
Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400

O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000

Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800

Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200

C	17.752800	10.662100	-4.523100
H	18.393600	10.804600	-3.618700
O	16.541600	11.394800	-4.256300
H	15.038300	10.070400	-3.701000
C	15.301800	10.749000	-4.546700
C	15.358800	9.943800	-5.848100
H	15.639500	10.671700	-6.649600
O	14.110200	9.338500	-6.104800
H	13.457400	10.061400	-6.019500
C	16.452300	8.870700	-5.810800
H	15.956600	7.914100	-5.527500
O	17.038300	8.810300	-7.101800
H	17.568000	7.993700	-7.146900
C	18.467100	11.345900	-5.700100
H	19.509200	10.966200	-5.770800
H	17.958000	11.071300	-6.654700
O	18.521800	12.737200	-5.485800
H	17.612200	12.968100	-5.202000
C	17.497900	9.165000	-4.707200
H	18.462500	8.692600	-5.022900
O	16.998900	8.573000	-3.513500
H	17.512200	8.936100	-2.768100
O	14.325500	11.732800	-4.739900
H	14.092300	12.099700	-3.868100

213

-212070.709365972987

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900

Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000

Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200

O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900

O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	18.422500	11.207700	-5.110300
H	19.063300	11.350200	-4.205900
O	17.211300	11.940400	-4.843500
H	15.708000	10.616000	-4.288200
C	15.971500	11.294600	-5.133900
C	16.028500	10.489400	-6.435300
H	16.309200	11.217300	-7.236800
O	14.779900	9.884100	-6.692000
H	14.127100	10.607000	-6.606700
C	17.122000	9.416300	-6.398000
H	16.626300	8.459700	-6.114700
O	17.708000	9.355900	-7.689000
H	18.237700	8.539300	-7.734100
C	19.136800	11.891500	-6.287300
H	20.178900	11.511800	-6.358000
H	18.627700	11.616900	-7.241900
O	19.191500	13.282800	-6.073000
H	18.281900	13.513700	-5.789200
C	18.167600	9.710600	-5.294400
H	19.132200	9.238200	-5.610100
O	17.668600	9.118600	-4.100700
H	18.181900	9.481700	-3.355300
O	14.995200	12.278400	-5.327100
H	14.762000	12.645300	-4.455300

-212070.707303409028

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800

Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200

Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600

O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	19.092200	11.753300	-5.697500
H	19.733000	11.895800	-4.793100

O	17.881000	12.486000	-5.430700
H	16.377700	11.161600	-4.875400
C	16.641200	11.840200	-5.721100
C	16.698200	11.035000	-7.022500
H	16.978900	11.762900	-7.824000
O	15.449600	10.429700	-7.279200
H	14.796800	11.152600	-7.193900
C	17.791700	9.961900	-6.985200
H	17.296000	9.005300	-6.701900
O	18.377700	9.901500	-8.276200
H	18.907400	9.084900	-8.321300
C	19.806500	12.437100	-6.874500
H	20.848600	12.057400	-6.945200
H	19.297400	12.162500	-7.829100
O	19.861200	13.828400	-6.660200
H	18.951600	14.059300	-6.376400
C	18.837300	10.256200	-5.881600
H	19.801900	9.783800	-6.197300
O	18.338300	9.664200	-4.687900
H	18.851600	10.027300	-3.942500
O	15.664900	12.824000	-5.914300
H	15.431700	13.190900	-5.042500

213

-212070.706761147798

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000

Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600

Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900

Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700

O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	19.761800	12.298900	-6.284700
H	20.402600	12.441400	-5.380300
O	18.550600	13.031600	-6.017900
H	17.047300	11.707200	-5.462600
C	17.310800	12.385800	-6.308300
C	17.367800	11.580600	-7.609700
H	17.648500	12.308500	-8.411200
O	16.119200	10.975300	-7.866400
H	15.466400	11.698200	-7.781100
C	18.461300	10.507500	-7.572400
H	17.965600	9.550900	-7.289100
O	19.047300	10.447100	-8.863400
H	19.577000	9.630500	-8.908500
C	20.476100	12.982700	-7.461700
H	21.518200	12.603000	-7.532400
H	19.967000	12.708100	-8.416300
O	20.530800	14.374000	-7.247400
H	19.621200	14.604900	-6.963600
C	19.506900	10.801800	-6.468800
H	20.471500	10.329400	-6.784500
O	19.007900	10.209800	-5.275100
H	19.521200	10.572900	-4.529700
O	16.334500	13.369600	-6.501500
H	16.101300	13.736500	-5.629700

213

-212070.706567085581

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
----	----------	----------	----------

Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000

Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800

O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200

Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	20.431500	12.844500	-6.871800
H	21.072300	12.987000	-5.967400
O	19.220300	13.577200	-6.605000
H	17.717000	12.252800	-6.049700

C	17.980500	12.931400	-6.895400
C	18.037500	12.126200	-8.196800
H	18.318200	12.854100	-8.998300
O	16.788900	11.520900	-8.453500
H	16.136100	12.243800	-8.368200
C	19.131000	11.053100	-8.159500
H	18.635300	10.096500	-7.876200
O	19.717000	10.992700	-9.450500
H	20.246700	10.176100	-9.495600
C	21.145800	13.528300	-8.048800
H	22.187900	13.148600	-8.119500
H	20.636700	13.253700	-9.003400
O	21.200500	14.919600	-7.834500
H	20.290900	15.150500	-7.550700
C	20.176600	11.347400	-7.055900
H	21.141200	10.875000	-7.371600
O	19.677600	10.755400	-5.862200
H	20.190900	11.118500	-5.116800
O	17.004200	13.915200	-7.088600
H	16.771000	14.282100	-6.216800

213

-212070.706456716376

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800

O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300

O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700

O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800

Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	21.101200	13.390100	-7.459000
H	21.742000	13.532600	-6.554600
O	19.889900	14.122800	-7.192200
H	18.386600	12.798400	-6.636900
C	18.650100	13.477000	-7.482600
C	18.707100	12.671800	-8.784000
H	18.987800	13.399700	-9.585500
O	17.458500	12.066500	-9.040700
H	16.805700	12.789400	-8.955400
C	19.800600	11.598700	-8.746700
H	19.304900	10.642100	-8.463400
O	20.386700	11.538300	-10.037700
H	20.916400	10.721700	-10.082800
C	21.815500	14.073900	-8.636000
H	22.857600	13.694200	-8.706700
H	21.306400	13.799300	-9.590600
O	21.870200	15.465200	-8.421700
H	20.960600	15.696100	-8.137900
C	20.846300	11.893000	-7.643100
H	21.810900	11.420600	-7.958800
O	20.347200	11.301000	-6.449400
H	20.860500	11.664100	-5.704000
O	17.673800	14.460800	-7.675800
H	17.440600	14.827700	-6.804000

213

-212070.706386318692

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800

Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200

Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700

Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800

Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	21.770800	13.935700	-8.046200
H	22.411600	14.078200	-7.141800
O	20.559600	14.668400	-7.779400
H	19.056300	13.344000	-7.224100
C	19.319800	14.022600	-8.069800
C	19.376800	13.217400	-9.371200

H	19.657500	13.945300	-10.172700
O	18.128200	12.612100	-9.627900
H	17.475400	13.335000	-9.542600
C	20.470300	12.144300	-9.333900
H	19.974600	11.187700	-9.050600
O	21.056300	12.083900	-10.624900
H	21.586000	11.267300	-10.670000
C	22.485100	14.619500	-9.223200
H	23.527200	14.239800	-9.293900
H	21.976000	14.344900	-10.177800
O	22.539800	16.010800	-9.008900
H	21.630200	16.241700	-8.725100
C	21.515900	12.438600	-8.230300
H	22.480500	11.966200	-8.546000
O	21.016900	11.846600	-7.036600
H	21.530200	12.209700	-6.291200
O	18.343500	15.006400	-8.263000
H	18.110300	15.373300	-7.391200

213

-212070.706339341676

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400

Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600

Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500

Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800

O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	22.440500	14.481300	-8.633400
H	23.081300	14.623800	-7.729000
O	21.229300	15.214000	-8.366600
H	19.726000	13.889600	-7.811300
C	19.989500	14.568200	-8.657000
C	20.046500	13.763000	-9.958400
H	20.327200	14.490900	-10.759900
O	18.797900	13.157700	-10.215100
H	18.145100	13.880600	-10.129800
C	21.140000	12.689900	-9.921100
H	20.644300	11.733300	-9.637800
O	21.726000	12.629500	-11.212100
H	22.255700	11.812900	-11.257200
C	23.154800	15.165100	-9.810400
H	24.196900	14.785400	-9.881100
H	22.645700	14.890500	-10.765000
O	23.209500	16.556400	-9.596100
H	22.299900	16.787300	-9.312300
C	22.185600	12.984200	-8.817500
H	23.150200	12.511800	-9.133200
O	21.686600	12.392200	-7.623800
H	22.199900	12.755300	-6.878400
O	19.013200	15.552000	-8.850200
H	18.780000	15.918900	-7.978400

213

-212070.706307888875

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400

Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500

Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800

Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000

O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	23.110100	15.026900	-9.220500
H	23.750900	15.169400	-8.316100
O	21.898900	15.759600	-8.953700
H	20.395600	14.435200	-8.398400
C	20.659100	15.113800	-9.244100
C	20.716100	14.308600	-10.545500
H	20.996800	15.036500	-11.347000
O	19.467500	13.703300	-10.802200

H	18.814700	14.426200	-10.716900
C	21.809600	13.235500	-10.508200
H	21.313900	12.278900	-10.224900
O	22.395600	13.175100	-11.799200
H	22.925300	12.358500	-11.844300
C	23.824400	15.710700	-10.397500
H	24.866500	15.331000	-10.468200
H	23.315300	15.436100	-11.352100
O	23.879100	17.102000	-10.183200
H	22.969500	17.332900	-9.899400
C	22.855200	13.529800	-9.404600
H	23.819800	13.057400	-9.720300
O	22.356200	12.937800	-8.210900
H	22.869500	13.300900	-7.465500
O	19.682800	16.097600	-9.437300
H	19.449600	16.464500	-8.565500

213

-212070.732737188198

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600

Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200

Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200

Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000

Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	16.805900	9.897700	-3.584100
H	17.446700	10.040200	-2.679700
O	15.594700	10.630400	-3.317300
H	14.091400	9.306000	-2.762000
C	14.354900	9.984600	-3.607700
C	14.411900	9.179400	-4.909100
H	14.692600	9.907300	-5.710600
O	13.163300	8.574100	-5.165800
H	12.510500	9.297000	-5.080500
C	15.505400	8.106300	-4.871800
H	15.009700	7.149700	-4.588500
O	16.091400	8.045900	-6.162800
H	16.621100	7.229300	-6.207900
C	17.520200	10.581500	-4.761100
H	18.562300	10.201800	-4.831800
H	17.011100	10.306900	-5.715700
O	17.574900	11.972800	-4.546800
H	16.665300	12.203700	-4.263000
C	16.551000	8.400600	-3.768200
H	17.515600	7.928200	-4.083900
O	16.052000	7.808600	-2.574500
H	16.565300	8.171700	-1.829100
O	13.378600	10.968400	-3.800900
H	13.145400	11.335300	-2.929100

213

-212070.729948187654

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800

Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100

Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600

O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400

Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	16.996400	10.054600	-3.828500
H	17.637200	10.197100	-2.924100
O	15.785200	10.787300	-3.561700
H	14.281900	9.462900	-3.006400
C	14.545400	10.141500	-3.852100
C	14.602400	9.336300	-5.153500
H	14.883100	10.064200	-5.955000
O	13.353800	8.731000	-5.410200
H	12.701000	9.453900	-5.324900
C	15.695900	8.263200	-5.116200

H	15.200200	7.306600	-4.832900
O	16.281900	8.202800	-6.407200
H	16.811600	7.386200	-6.452300
C	17.710700	10.738400	-5.005500
H	18.752800	10.358700	-5.076200
H	17.201600	10.463800	-5.960100
O	17.765400	12.129700	-4.791200
H	16.855800	12.360600	-4.507400
C	16.741500	8.557500	-4.012600
H	17.706100	8.085100	-4.328300
O	16.242500	7.965500	-2.818900
H	16.755800	8.328600	-2.073500
O	13.569100	11.125300	-4.045300
H	13.335900	11.492200	-3.173500

213

-212070.719309813227

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400

O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900

O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700

Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300

Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
C	17.454600	10.482800	-4.395600
H	18.095400	10.625300	-3.491200
O	16.243400	11.215500	-4.128800
H	14.740100	9.891100	-3.573500
C	15.003600	10.569700	-4.419200
C	15.060600	9.764500	-5.720600
H	15.341300	10.492400	-6.522100
O	13.812000	9.159200	-5.977300
H	13.159200	9.882100	-5.892000
C	16.154100	8.691400	-5.683300
H	15.658400	7.734800	-5.400000
O	16.740100	8.631000	-6.974300
H	17.269800	7.814400	-7.019400
C	18.168900	11.166600	-5.572600
H	19.211000	10.786900	-5.643300
H	17.659800	10.892000	-6.527200
O	18.223600	12.557900	-5.358300
H	17.314000	12.788800	-5.074500
C	17.199700	8.985700	-4.579700
H	18.164300	8.513300	-4.895400
O	16.700700	8.393700	-3.386000
H	17.214000	8.756800	-2.640600
O	14.027300	11.553500	-4.612400
H	13.794100	11.920400	-3.740600

Cartesian coordinates for the calculated potential energy profile for the adsorption of oxygen (O₂) at the surface of Cu₂O cube (Cu₂O (100))

191
-211533.000334314158

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800

Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000

O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600

O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800

Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
O	9.870400	5.260300	6.436200
O	9.847900	4.048500	6.498200

191

-211533.003717971267

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000

Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200

O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800

O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800

Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
O	9.924100	5.256900	6.430900
O	9.901600	4.045100	6.492900

191

-211533.004834059655

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
----	----------	----------	----------

Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200

Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800

Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000

Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
O	10.043600	5.251000	6.419300
O	10.021100	4.039200	6.481300

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400

Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000

Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000

Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
O	10.284400	5.202800	6.395200
O	10.261900	3.991000	6.457200

-211532.978816236719

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400

Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000

Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400

Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
O	11.085300	5.246000	6.340400
O	11.062800	4.034200	6.402400

191

-211532.946136755345

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200

Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800

Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800

O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
O	13.488100	5.375700	6.176100

O	13.465600	4.164000	6.238200
191			
-211532.945673873095			
Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400

O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000

O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800

Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200

O	14.289000	5.419000	6.121400
O	14.266500	4.207200	6.183400
191			
-211532.946905602817			
Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600

O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200

O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000

Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600

O	5.337000	11.741400	13.876200
O	15.089900	5.462200	6.066600
O	15.067400	4.250500	6.128700
191			
-211532.945442059339			
Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800
Cu	0.000000	8.539200	4.269600

Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
Cu	4.269600	4.269600	8.539200

Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800
Cu	6.404400	0.000000	10.674000

Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400
O	5.337000	11.741400	5.337000

O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
O	16.691800	5.548700	5.957100
O	16.669300	4.337000	6.019200

191

-211532.940499164572

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	-2.134800	2.134800	0.000000
Cu	-2.134800	0.000000	2.134800
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	0.000000	0.000000	4.269600
Cu	-2.134800	2.134800	4.269600
O	-1.067400	1.067400	3.202200
Cu	-2.134800	0.000000	6.404400
Cu	0.000000	2.134800	6.404400
Cu	0.000000	0.000000	8.539200
Cu	-2.134800	2.134800	8.539200
O	-1.067400	1.067400	7.471800
Cu	-2.134800	0.000000	10.674000
Cu	0.000000	2.134800	10.674000
Cu	0.000000	0.000000	12.808800
Cu	-2.134800	2.134800	12.808800
O	-1.067400	1.067400	11.741400
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	-2.134800	6.404400	0.000000
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	-2.134800	6.404400	4.269600
O	-3.202200	3.202200	1.067400
O	-1.067400	5.337000	3.202200
Cu	-2.134800	4.269600	6.404400
Cu	0.000000	6.404400	6.404400
Cu	0.000000	4.269600	8.539200
Cu	-2.134800	6.404400	8.539200
O	-3.202200	3.202200	5.337000
O	-1.067400	5.337000	7.471800
Cu	-2.134800	4.269600	10.674000
Cu	0.000000	6.404400	10.674000
Cu	0.000000	4.269600	12.808800
Cu	-2.134800	6.404400	12.808800
O	-3.202200	3.202200	9.606600
O	-1.067400	5.337000	11.741400
O	-3.202200	3.202200	13.876200
Cu	0.000000	8.539200	0.000000
Cu	-2.134800	10.674000	0.000000
Cu	-2.134800	8.539200	2.134800
Cu	0.000000	10.674000	2.134800

Cu	0.000000	8.539200	4.269600
Cu	-2.134800	10.674000	4.269600
O	-3.202200	7.471800	1.067400
O	-1.067400	9.606600	3.202200
Cu	-2.134800	8.539200	6.404400
Cu	0.000000	10.674000	6.404400
Cu	0.000000	8.539200	8.539200
Cu	-2.134800	10.674000	8.539200
O	-3.202200	7.471800	5.337000
O	-1.067400	9.606600	7.471800
Cu	-2.134800	8.539200	10.674000
Cu	0.000000	10.674000	10.674000
Cu	0.000000	8.539200	12.808800
Cu	-2.134800	10.674000	12.808800
O	-3.202200	7.471800	9.606600
O	-1.067400	9.606600	11.741400
O	-3.202200	7.471800	13.876200
O	-3.202200	11.741400	1.067400
O	-3.202200	11.741400	5.337000
O	-3.202200	11.741400	9.606600
O	-3.202200	11.741400	13.876200
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
O	3.202200	1.067400	3.202200
Cu	2.134800	0.000000	6.404400
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	4.269600	0.000000	8.539200
Cu	2.134800	2.134800	8.539200
O	3.202200	1.067400	7.471800
Cu	2.134800	0.000000	10.674000
Cu	4.269600	2.134800	10.674000
Cu	4.269600	0.000000	12.808800
Cu	2.134800	2.134800	12.808800
O	3.202200	1.067400	11.741400
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
O	1.067400	3.202200	1.067400
O	3.202200	5.337000	3.202200
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
Cu	4.269600	6.404400	6.404400

Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	2.134800	6.404400	8.539200
O	1.067400	3.202200	5.337000
O	3.202200	5.337000	7.471800
Cu	2.134800	4.269600	10.674000
Cu	4.269600	6.404400	10.674000
Cu	4.269600	4.269600	12.808800
Cu	2.134800	6.404400	12.808800
O	1.067400	3.202200	9.606600
O	3.202200	5.337000	11.741400
O	1.067400	3.202200	13.876200
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	2.134800	10.674000	0.000000
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	2.134800	10.674000	4.269600
O	1.067400	7.471800	1.067400
O	3.202200	9.606600	3.202200
Cu	2.134800	8.539200	6.404400
Cu	4.269600	10.674000	6.404400
Cu	4.269600	8.539200	8.539200
Cu	2.134800	10.674000	8.539200
O	1.067400	7.471800	5.337000
O	3.202200	9.606600	7.471800
Cu	2.134800	8.539200	10.674000
Cu	4.269600	10.674000	10.674000
Cu	4.269600	8.539200	12.808800
Cu	2.134800	10.674000	12.808800
O	1.067400	7.471800	9.606600
O	3.202200	9.606600	11.741400
O	1.067400	7.471800	13.876200
O	1.067400	11.741400	1.067400
O	1.067400	11.741400	5.337000
O	1.067400	11.741400	9.606600
O	1.067400	11.741400	13.876200
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	6.404400	2.134800	0.000000
Cu	6.404400	0.000000	2.134800
Cu	8.539200	2.134800	2.134800
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
O	7.471800	1.067400	3.202200
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
O	7.471800	1.067400	7.471800

Cu	6.404400	0.000000	10.674000
Cu	8.539200	2.134800	10.674000
Cu	8.539200	0.000000	12.808800
Cu	6.404400	2.134800	12.808800
O	7.471800	1.067400	11.741400
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	6.404400	6.404400	0.000000
Cu	6.404400	4.269600	2.134800
Cu	8.539200	6.404400	2.134800
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
O	5.337000	3.202200	1.067400
O	7.471800	5.337000	3.202200
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	3.202200	5.337000
O	7.471800	5.337000	7.471800
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
Cu	8.539200	6.404400	10.674000
Cu	8.539200	4.269600	12.808800
Cu	6.404400	6.404400	12.808800
O	5.337000	3.202200	9.606600
O	7.471800	5.337000	11.741400
O	5.337000	3.202200	13.876200
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	6.404400	10.674000	0.000000
Cu	6.404400	8.539200	2.134800
Cu	8.539200	10.674000	2.134800
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	7.471800	1.067400
O	7.471800	9.606600	3.202200
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
Cu	8.539200	10.674000	6.404400
Cu	8.539200	8.539200	8.539200
Cu	6.404400	10.674000	8.539200
O	5.337000	7.471800	5.337000
O	7.471800	9.606600	7.471800
Cu	6.404400	8.539200	10.674000
Cu	8.539200	10.674000	10.674000
Cu	8.539200	8.539200	12.808800
Cu	6.404400	10.674000	12.808800
O	5.337000	7.471800	9.606600
O	7.471800	9.606600	11.741400
O	5.337000	7.471800	13.876200
O	5.337000	11.741400	1.067400

O	5.337000	11.741400	5.337000
O	5.337000	11.741400	9.606600
O	5.337000	11.741400	13.876200
O	17.492700	5.591900	5.902300
O	17.470200	4.380200	5.964400

Cartesian coordinates for the calculated potential energy profile for the adsorption of oxygen (O₂) at the surface of Cu₂O octahedron (Cu₂O (111)).

```

191
-211534.841496185953
Cu  0.000000  0.000000  0.000000
Cu  0.000000  4.269600  0.000000
Cu  0.000000  2.134800  2.134800
Cu -2.134800  4.269600  2.134800
O  -1.067400  3.202200  1.067400
Cu  0.000000  4.269600  4.269600
Cu  0.000000  6.404400  2.134800
Cu  4.269600 -4.269600  0.000000
Cu  4.269600  0.000000 -4.269600
Cu  4.271500 -2.134800 -2.136700
Cu  2.137500 -0.001100 -2.138100
O   3.103800 -1.236100 -3.304300
Cu  2.134800 -2.134800  0.000000
Cu  4.269600  0.000000  0.000000
Cu  4.269600 -2.134800  2.134800
Cu  2.134800  0.000000  2.134800
O   3.202200 -1.067400  1.067400
Cu  4.269600  0.000000  4.269600
Cu  4.269600  4.269600 -4.269600
Cu  4.270400  2.134800 -2.135600
Cu  2.135300  4.268500 -2.135900
O   3.202900  3.202200 -3.202900
Cu  2.134800  2.134800  0.000000
Cu  4.269600  4.269600  0.000000
Cu  4.269600  2.134800  2.134800
Cu  2.134800  4.269600  2.134800
O   1.067400  1.067400 -1.067400
O   3.202200  3.202200  1.067400
Cu  2.134800  2.134800  4.269600
Cu  4.269600  4.269600  4.269600
Cu  4.269600  2.134800  6.404400
Cu  2.134800  4.269600  6.404400
O   1.067400  1.067400  3.202200
O   3.202200  3.202200  5.337000
Cu  4.269600  4.269600  8.539200

```

Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000

Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400

Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900

O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	13.406000	7.880700	-4.242100
O	13.263900	6.952800	-5.011300

191

-211534.880063910445

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000

Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500

Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300

Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200

O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	13.462800	7.946400	-4.320900
O	13.320700	7.018600	-5.090100

191

-211534.885037146567

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200

O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400

Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000

Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000

Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	13.519700	8.012100	-4.399800
O	13.377600	7.084300	-5.169000

191

-211534.882680967130

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400

O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900

O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700

Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300

Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	13.576600	8.077800	-4.478700
O	13.434500	7.150000	-5.247900

191

-211534.850261207321

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400

Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700

O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700

Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400

Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	13.747300	8.275000	-4.715300
O	13.605200	7.347200	-5.484500

191

-211534.857424685004

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600

Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200

Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200

Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000

Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	13.974800	8.537900	-5.030900
O	13.832700	7.610100	-5.800100

191

-211534.865512211982

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600

Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000

Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600

O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000

Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	14.202300	8.800800	-5.346400
O	14.060200	7.873000	-6.115600

191

-211534.866355493083

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400

Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600

Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500

Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800

O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	14.429900	9.063700	-5.661900
O	14.287800	8.135900	-6.431100

191

-211534.866678081074

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800
O	1.067400	1.067400	-1.067400

O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300
O	7.474300	3.206500	-7.472000

Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700
O	5.335800	9.606600	-1.066200

O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800
Cu	10.670700	10.676100	0.004400

O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	14.657400	9.326600	-5.977400
O	14.515300	8.398800	-6.746600

191

-211534.870877745736

Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	4.269600	0.000000
Cu	0.000000	2.134800	2.134800
Cu	-2.134800	4.269600	2.134800
O	-1.067400	3.202200	1.067400
Cu	0.000000	4.269600	4.269600
Cu	0.000000	6.404400	2.134800
Cu	4.269600	-4.269600	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	-4.269600
Cu	4.271500	-2.134800	-2.136700
Cu	2.137500	-0.001100	-2.138100
O	3.103800	-1.236100	-3.304300
Cu	2.134800	-2.134800	0.000000
Cu	4.269600	0.000000	0.000000
Cu	4.269600	-2.134800	2.134800
Cu	2.134800	0.000000	2.134800
O	3.202200	-1.067400	1.067400
Cu	4.269600	0.000000	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	-4.269600
Cu	4.270400	2.134800	-2.135600
Cu	2.135300	4.268500	-2.135900
O	3.202900	3.202200	-3.202900
Cu	2.134800	2.134800	0.000000
Cu	4.269600	4.269600	0.000000
Cu	4.269600	2.134800	2.134800
Cu	2.134800	4.269600	2.134800

O	1.067400	1.067400	-1.067400
O	3.202200	3.202200	1.067400
Cu	2.134800	2.134800	4.269600
Cu	4.269600	4.269600	4.269600
Cu	4.269600	2.134800	6.404400
Cu	2.134800	4.269600	6.404400
O	1.067400	1.067400	3.202200
O	3.202200	3.202200	5.337000
Cu	4.269600	4.269600	8.539200
Cu	4.269300	6.404400	-2.134500
Cu	2.134800	6.404400	0.000000
Cu	4.269600	8.539200	0.000000
Cu	4.269600	6.404400	2.134800
Cu	2.134800	8.539200	2.134800
O	1.067400	5.337000	-1.067400
O	3.202200	7.471800	1.067400
Cu	2.134800	6.404400	4.269600
Cu	4.269600	8.539200	4.269600
Cu	4.269600	6.404400	6.404400
O	1.067400	5.337000	3.202200
Cu	4.269600	10.674000	2.134800
Cu	6.409200	-4.268500	-2.139000
Cu	8.539200	-4.269600	0.000000
Cu	6.408100	-4.270700	2.130600
O	7.474000	-5.337000	1.065200
Cu	8.539200	-4.269600	4.269600
Cu	6.408200	0.003200	-6.406500
Cu	6.408700	-2.132600	-4.272800
Cu	8.542500	0.003200	-4.271100
Cu	8.543000	-2.132700	-2.137400
Cu	6.407100	0.001100	-2.136900
O	7.475300	-1.065300	-3.204500
Cu	6.406000	-2.134800	-0.001600
Cu	8.539200	0.000000	0.000000
Cu	8.540500	-2.134800	2.133500
Cu	6.405900	-0.001100	2.132700
O	5.339000	-3.202200	-1.069400
O	7.473000	-1.067400	1.066200
Cu	6.404400	-2.134800	4.269600
Cu	8.539200	0.000000	4.269600
Cu	8.539200	-2.134800	6.404400
Cu	6.404400	0.000000	6.404400
O	5.337000	-3.202200	3.202200
O	7.471800	-1.067400	5.337000
Cu	8.539200	0.000000	8.539200
Cu	8.541500	4.275000	-8.538600
Cu	8.542000	2.139100	-6.404800
Cu	6.406100	4.272800	-6.404300

O	7.474300	3.206500	-7.472000
Cu	6.406600	2.136900	-4.270600
Cu	8.540300	4.272800	-4.269000
Cu	8.540800	2.136900	-2.135200
Cu	6.404900	4.270700	-2.134700
O	5.340000	1.069500	-5.338900
O	7.473200	3.204300	-3.202400
Cu	6.404900	2.134800	-0.000500
Cu	8.539200	4.269600	0.000000
Cu	8.539400	2.134800	2.134600
Cu	6.403800	4.268500	2.134900
O	5.337900	1.067400	-1.068300
O	7.471900	3.202200	1.067300
Cu	6.404400	2.134800	4.269600
Cu	8.539200	4.269600	4.269600
Cu	8.539200	2.134800	6.404400
Cu	6.404400	4.269600	6.404400
O	5.337000	1.067400	3.202200
O	7.471800	3.202200	5.337000
Cu	6.404400	2.134800	8.539200
Cu	8.539200	4.269600	8.539200
Cu	6.404400	4.269600	10.674000
O	5.337000	1.067400	7.471800
O	7.471800	3.202200	9.606600
Cu	8.539800	6.408700	-6.402700
Cu	6.404400	6.406500	-4.268500
Cu	8.538200	8.542400	-4.266800
Cu	8.538700	6.406500	-2.133100
Cu	6.402800	8.540300	-2.132600
O	5.337900	5.339100	-5.336700
O	7.471000	7.473900	-3.200200
Cu	6.403800	6.404400	0.000600
Cu	8.539200	8.539200	0.000000
Cu	8.538300	6.404400	2.135700
Cu	6.401600	8.538100	2.137000
O	5.336900	5.337000	-1.067300
O	7.470800	7.471800	1.068400
Cu	6.404400	6.404400	4.269600
Cu	8.539200	8.539200	4.269600
Cu	8.539200	6.404400	6.404400
Cu	6.404400	8.539200	6.404400
O	5.337000	5.337000	3.202200
O	7.471800	7.471800	5.337000
Cu	6.404400	6.404400	8.539200
O	5.337000	5.337000	7.471800
Cu	8.536500	10.676100	-2.130900
Cu	6.402800	10.674000	0.001600
Cu	8.537300	10.674000	2.136700

O	5.335800	9.606600	-1.066200
O	7.469700	11.741400	1.069500
Cu	6.404400	10.674000	4.269600
O	5.337000	9.606600	3.202200
Cu	10.677700	-4.268500	2.131700
Cu	10.676700	0.003200	-2.135700
Cu	10.677200	-2.132700	-0.002000
Cu	12.810900	0.003200	-0.000300
Cu	12.811400	-2.132700	2.133400
Cu	10.675500	0.001100	2.133900
O	9.610600	-3.200100	-1.070200
O	11.743700	-1.065300	1.066200
Cu	10.675000	-2.134800	4.268600
Cu	12.808800	0.000000	4.269600
Cu	10.674300	-0.001100	6.403500
O	9.608000	-3.202200	3.200800
Cu	10.675700	4.275000	-6.403200
Cu	10.676200	2.139100	-4.269500
Cu	12.809900	4.275000	-4.267800
Cu	12.810400	2.139100	-2.134100
Cu	10.674500	4.272800	-2.133600
O	9.609600	1.071700	-5.337700
O	11.742800	3.206500	-3.201200
Cu	10.675000	2.136900	0.000100
Cu	12.808700	4.272800	0.001800
Cu	12.809200	2.136900	2.135500
Cu	10.673400	4.270700	2.136000
O	9.608500	1.069500	-1.068100
O	11.741600	3.204300	1.068400
Cu	10.673900	2.134800	4.269700
Cu	12.808800	4.269600	4.269600
Cu	10.672200	4.268500	6.405600
O	9.606900	1.067400	3.201900
O	11.740900	3.202200	5.337500
O	9.606600	1.067400	7.471800
Cu	10.674000	6.408700	-4.267300
Cu	12.808300	6.408700	-2.131900
Cu	10.672400	8.542400	-2.131400
O	9.607500	5.341300	-5.335500
Cu	10.672900	6.406500	0.002300
Cu	12.806600	8.542400	0.004000
Cu	12.807100	6.406500	2.137700
Cu	10.671200	8.540300	2.138200
O	9.606300	5.339100	-1.065900
O	11.739400	7.473900	1.070500
Cu	10.672900	6.404400	4.270700
O	9.605900	5.337000	3.202900
O	9.606600	5.337000	7.471800

Cu	10.670700	10.676100	0.004400
O	9.604200	9.608700	-1.063800
O	9.604800	9.606600	3.204000
Cu	14.945100	0.003200	2.135000
Cu	14.944100	4.275000	-2.132400
Cu	14.944600	2.139100	0.001300
Cu	17.078300	4.275000	0.003000
Cu	14.943000	4.272800	2.137200
O	13.878100	1.071700	-1.066900
O	16.011200	3.206500	1.069500
O	13.876900	1.069500	3.202700
Cu	14.942500	6.408700	0.003500
O	13.875900	5.341300	-1.064800
O	13.874700	5.339100	3.204800
O	3.190400	7.490000	5.370000
O	11.773600	7.494300	-3.210900
O	11.791400	-1.286300	5.385800
O	7.548800	11.553800	-3.193600
O	3.206800	11.551600	1.147200
O	15.112500	9.852400	-6.608500
O	14.970400	8.924600	-7.377700