

Supporting Information for

The Key Role of Support Surface Hydrogenation in the CH₄-to-CH₃OH Selective Oxidation by ZrO₂-Supported Single-Atom Catalyst

Karim Harrath[†], Xiaohu Yu[‡], Hai Xiao^{†*}, and Jun Li^{†§*}

[†] Department of Chemistry and Key Laboratory of Organic Optoelectronics & Molecular Engineering of Ministry of Education, Tsinghua University, Beijing 100084, China

[‡] Shaanxi Key Laboratory of Catalysis and School of Chemical & Environment Sciences, Shaanxi University of Technology, Hanzhong 723000, China

[§] Department of Chemistry, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China

Table of Contents

Figure S1. The energy profile of CH ₄ conversion to CH ₃ OH on Rh ₁ /ZrO ₂ via radical pathway.	S2
Figure S2. The energy profile of CH ₄ conversion to CH ₃ OH on Rh ₁ /ZrO ₂ via non-radical pathway.	S3
Figure S3. The energy profile of CH ₄ conversion to CH ₃ OOH on Rh ₁ /ZrO ₂ via radical pathway.	S4
Figure S4. The energy profile of CH ₄ conversion to CH ₃ OOH on Rh ₁ /ZrO ₂ via non-radical pathway.	S4
Figure S5. The energy profile and structures of *CH ₃ → *CH ₂ + *H process on Rh ₁ /ZrO ₂ .	S5
Figure S6. The energy profile and structures of CH ₃ OOH conversion to methanol (blue line) and to CH ₂ O (red line) on Rh ₁ /ZrO ₂ .	S6
Figure S7. The energy profile and structures of methanol conversion to CH ₂ O (red line) and methanol regeneration (blue line) on Rh ₁ /ZrO ₂ .	S7
Figure S8. The reaction network of methane conversion on Ru ₁ /ZrO ₂ .	S8
Figure S9. The energy profile and structures of methanol activation on Fe ₁ /ZrO ₂ .	S9
Figure S10. The structures of intermediates in the conversion of methane on Rh ₁ /ZrO ₂ .	S10
Figure S11. The structures of intermediates in the conversion of methane on Ru ₁ /ZrO ₂ .	S11
Figure S12. The structures of intermediates in the conversion of methane on Fe ₁ /ZrO ₂ .	S12
Table S1. The selected reaction energies and activation barriers for methane activation on Rh ₁ /ZrO ₂ calculated with a 3×3×1 k-point mesh and only the Γ-point.	S13

Table S2. Adsorption energies (E_{ads} , in eV) of H_2O_2 and O_2 on Ag_1/ZrO_2 , Au_1/ZrO_2 , Cu_1/ZrO_2 , Fe_1/ZrO_2 , Os_1/ZrO_2 , Ni_1/ZrO_2 and Ru_1/ZrO_2 .

S13

Table S3. The selected reaction energies and activation barriers for methane activation on Rh_1/ZrO_2 calculated with different slab model thickness.

S14

Coordinates (in POSCAR format) of the Selected Intermediates and Transition States

S15

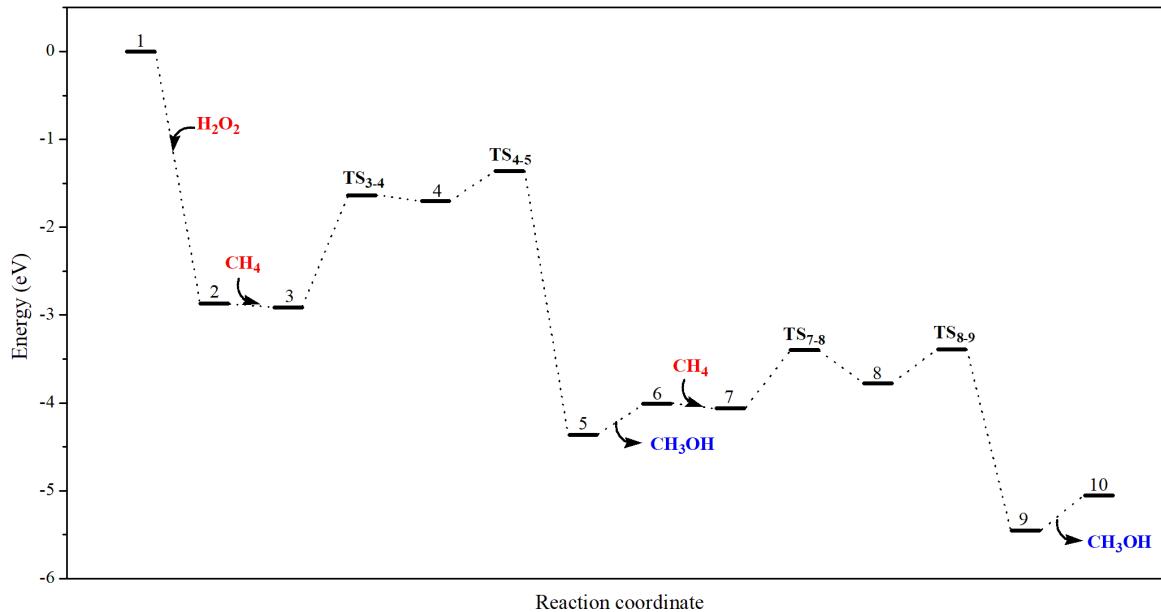


Figure S1. The energy profile of CH_4 conversion to CH_3OH on Rh_1/ZrO_2 via radical pathway (see Fig. S10 for the detailed configurations of numbered species).

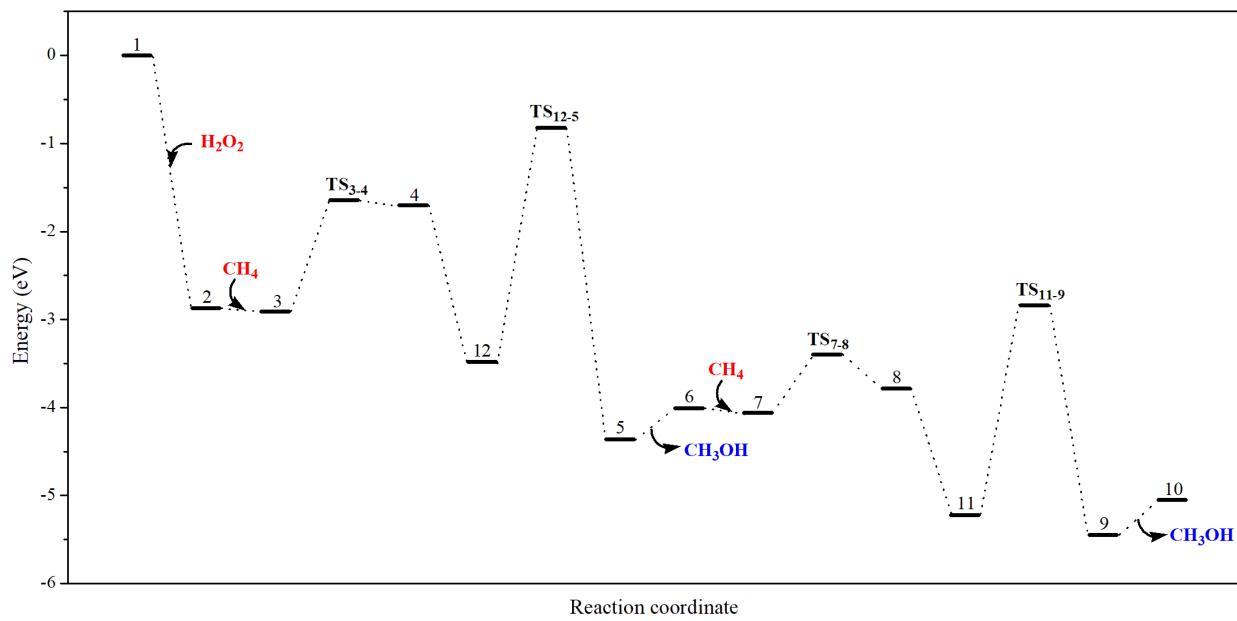


Figure S2. The energy profile of CH_4 conversion to CH_3OH on Rh_1/ZrO_2 via non-radical pathway (see Fig. S10 for the detailed configurations of numbered species).

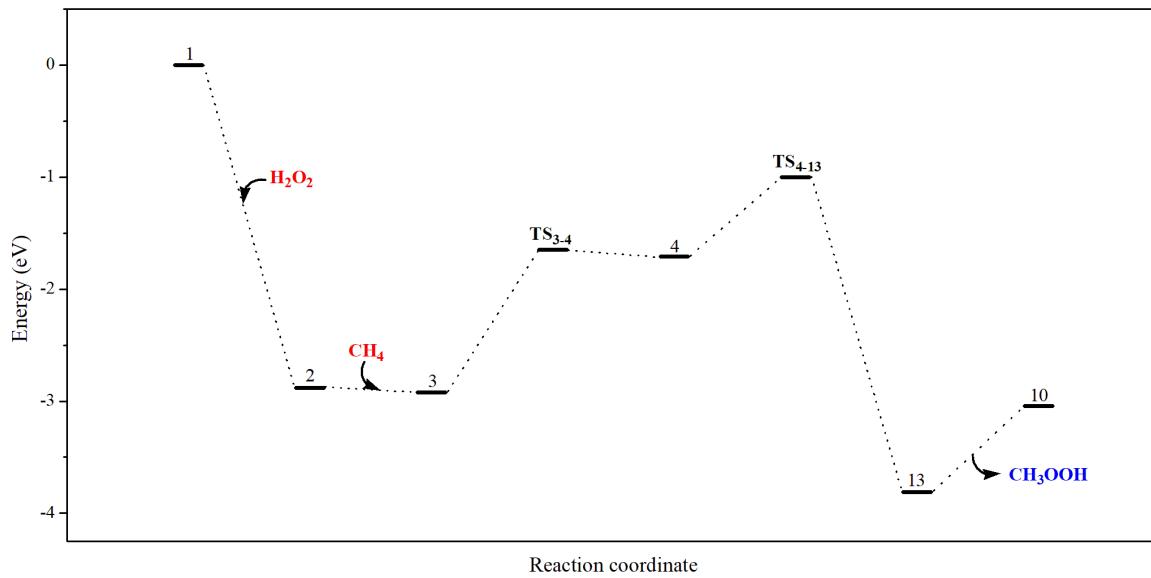


Figure S3. The energy profile of CH_4 conversion to CH_3OOH on Rh_1/ZrO_2 via radical pathway (see Fig. S10 for the detailed configurations of numbered species).

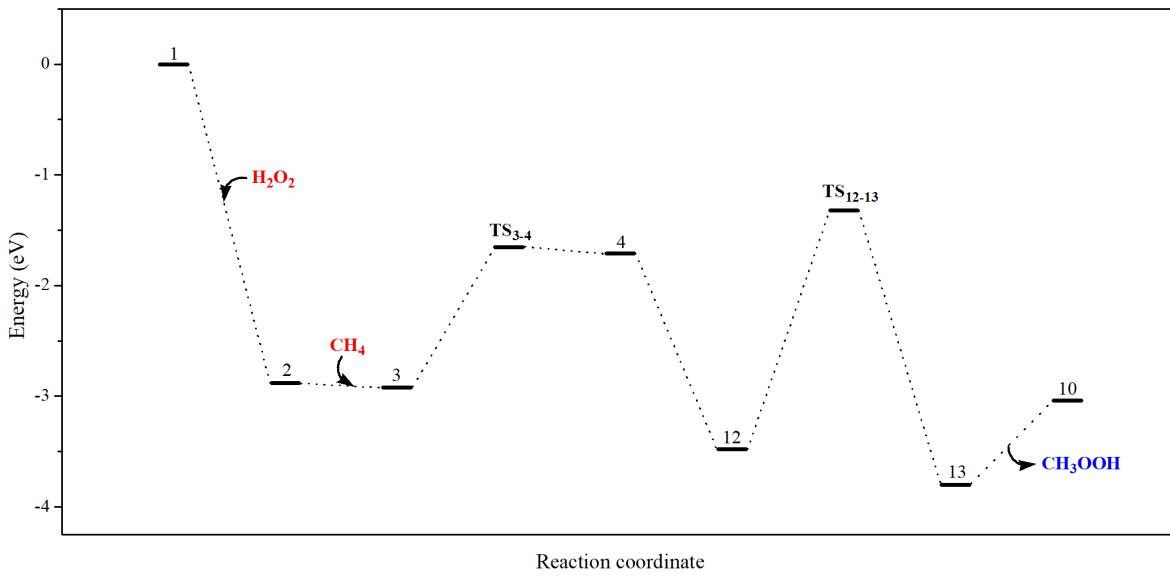


Figure S4. The energy profile of CH_4 conversion to CH_3OOH on Rh_1/ZrO_2 via non-radical pathway (see Fig. S10 for the detailed configurations of numbered species).

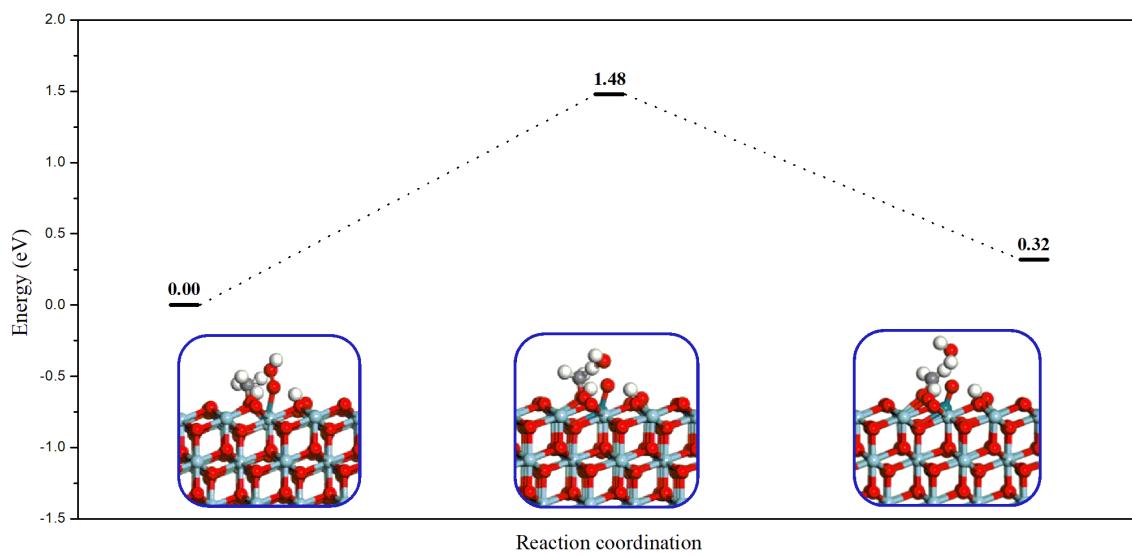


Figure S5. The energy profile and structures of $*\text{CH}_3 \rightarrow *\text{CH}_2 + *\text{H}$ process on Rh_1/ZrO_2 .

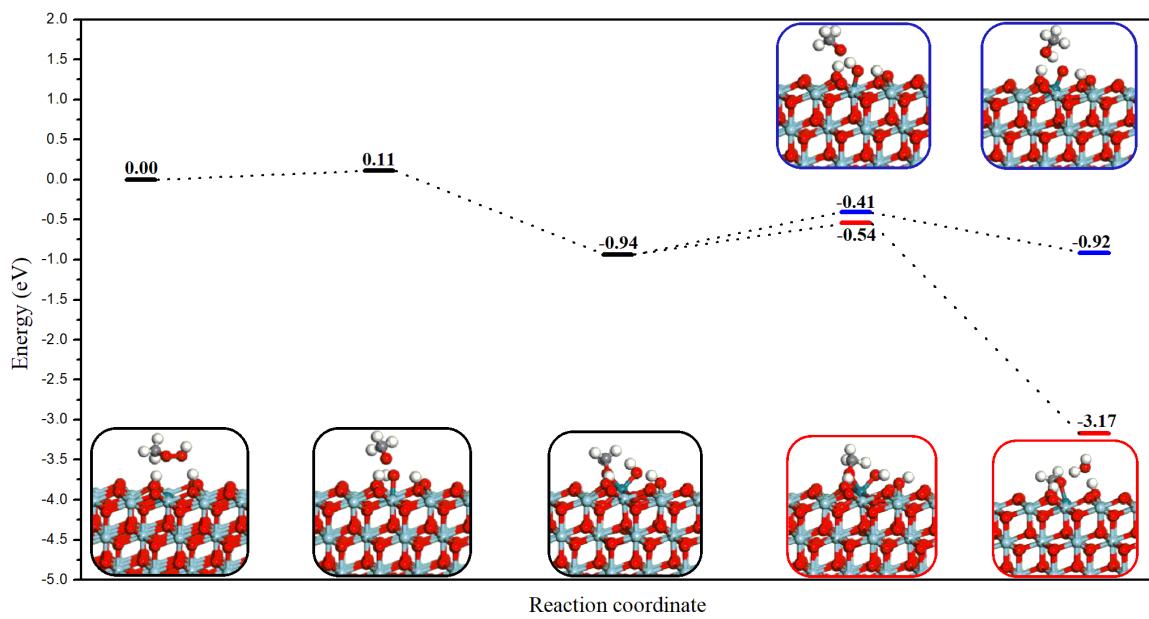


Figure S6. The energy profile and structures of CH_3OOH conversion to methanol (blue line) and to CH_2O (red line) on Rh_1/ZrO_2 .

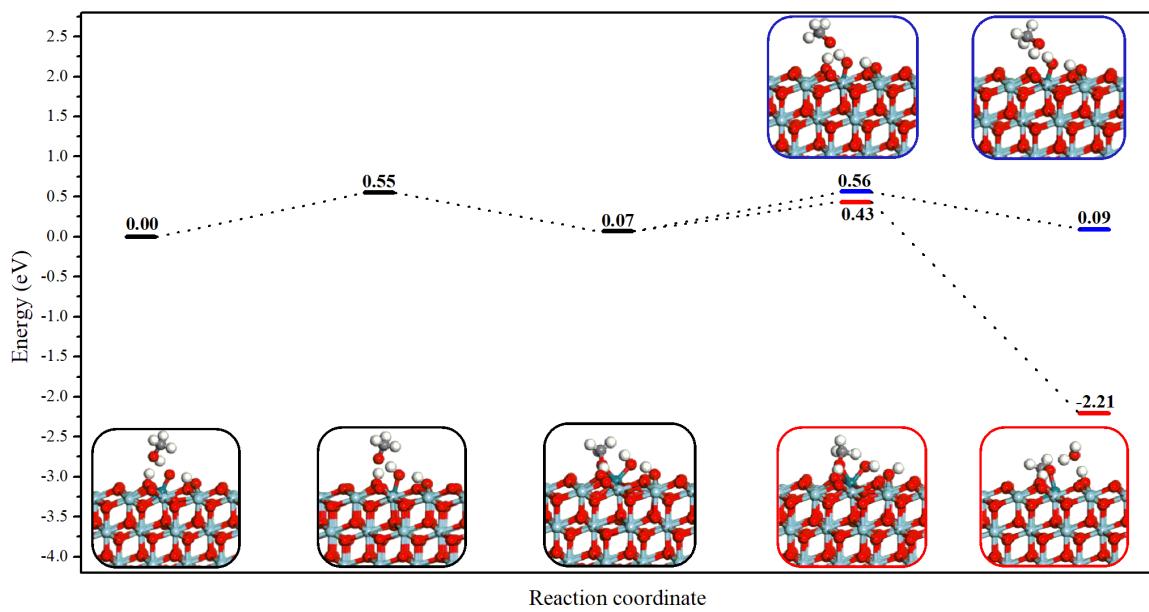


Figure S7. The energy profile and structures of methanol conversion to CH_2O (red line) and methanol regeneration (blue line) on Rh_1/ZrO_2 .

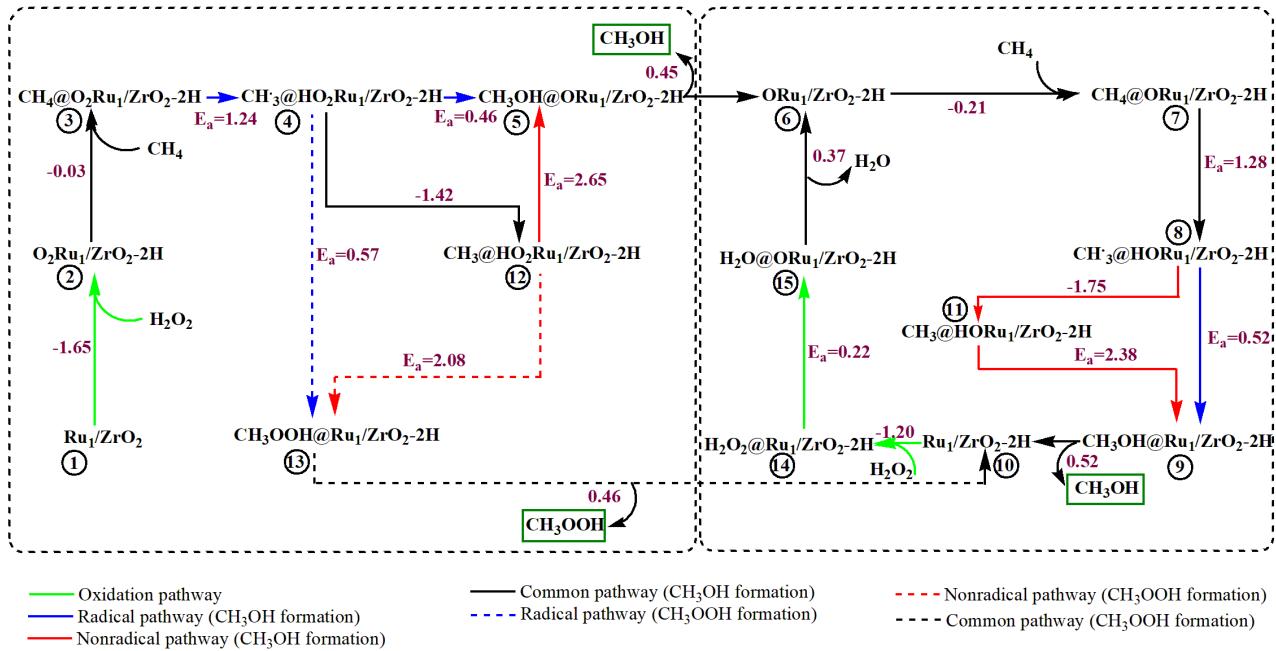


Figure S8. The reaction network of methane conversion on Ru_1/ZrO_2 SAC (see Fig. S11 for the detailed configurations of numbered species).

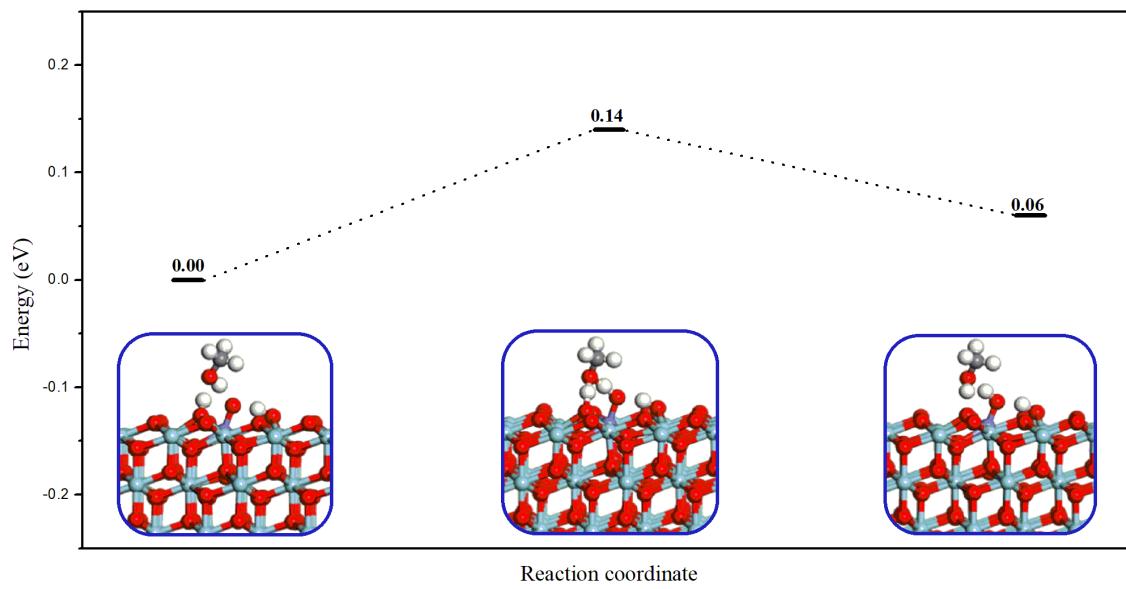


Figure S9. The energy profile and structures of methanol activation on Fe_1/ZrO_2 .

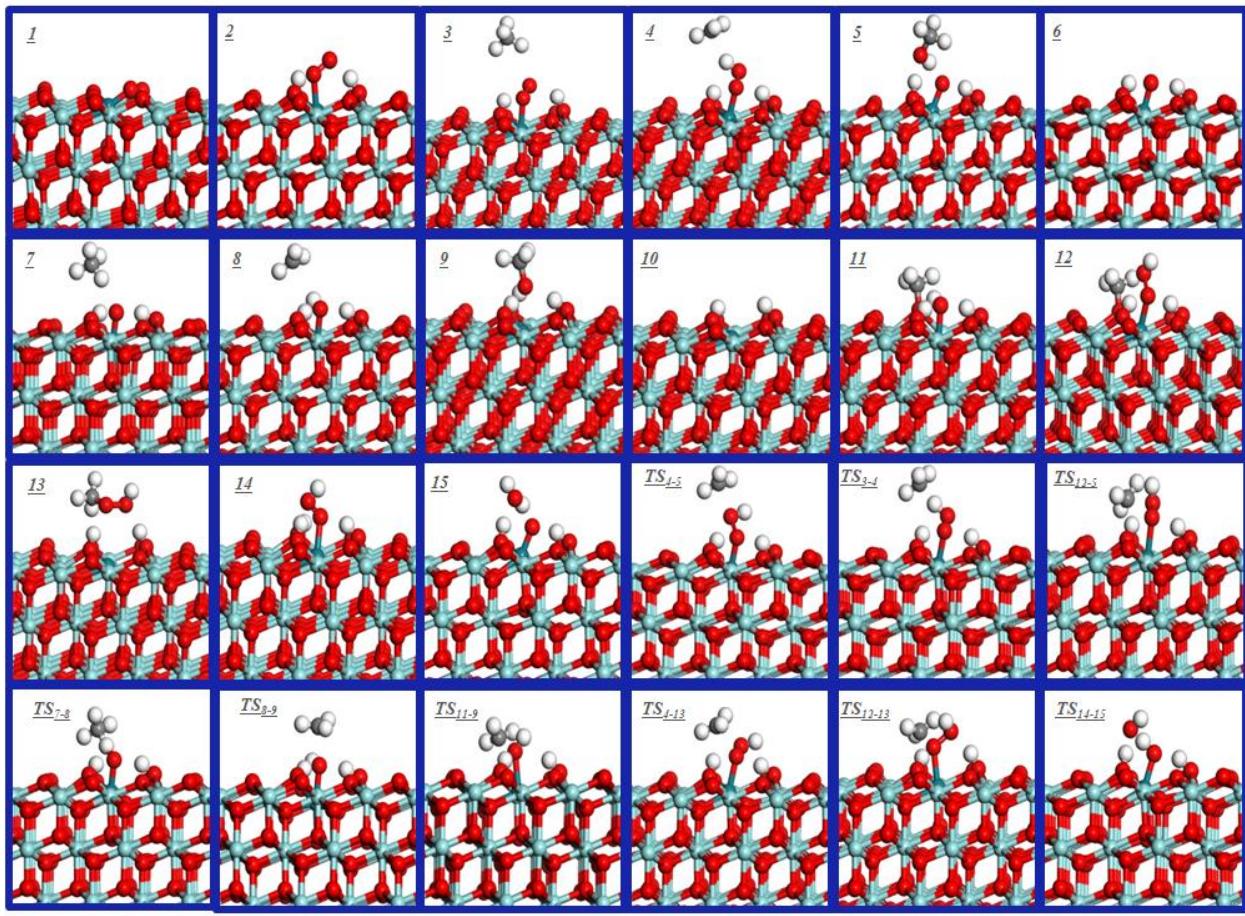


Figure S10. The structures of intermediates in the conversion of methane on Rh₁/ZrO₂.

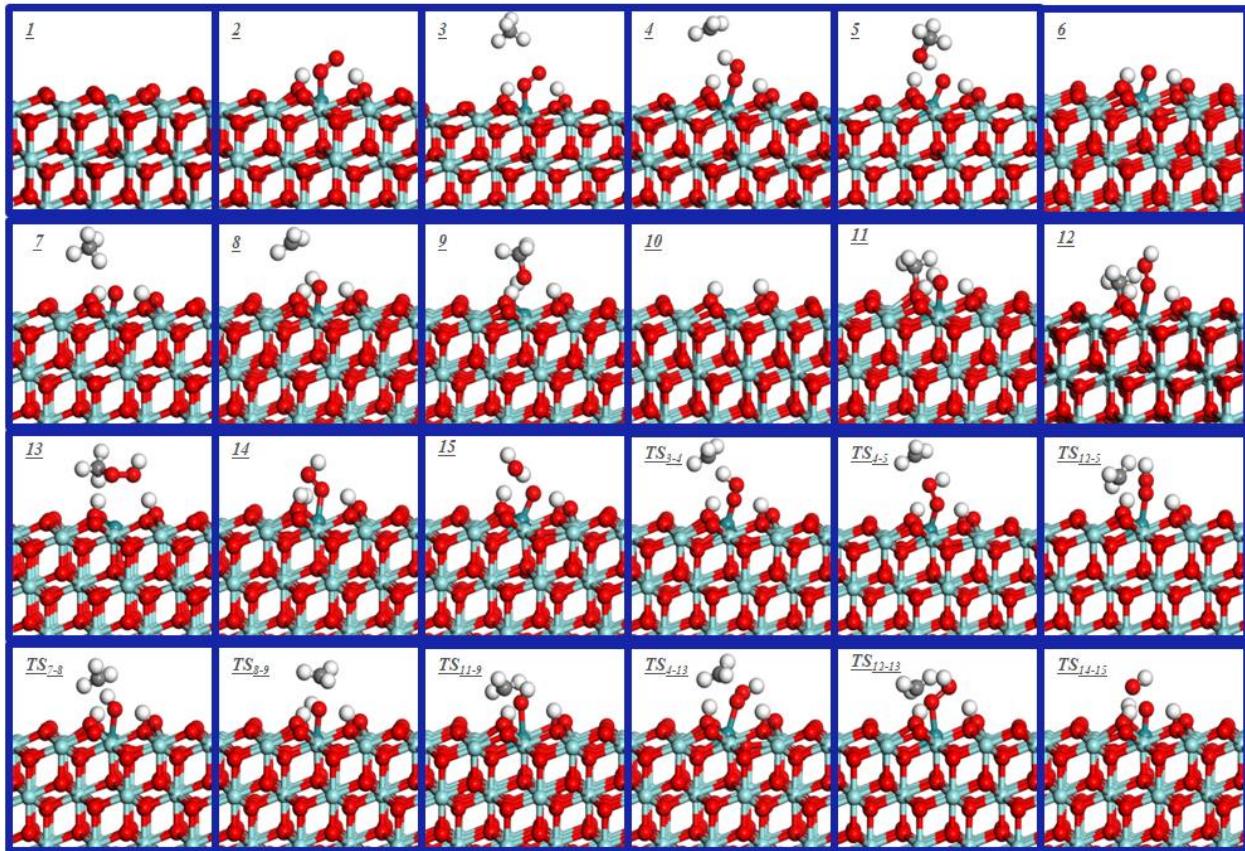


Figure S11. The structures of intermediates in the conversion of methane on Ru₁/ZrO₂.

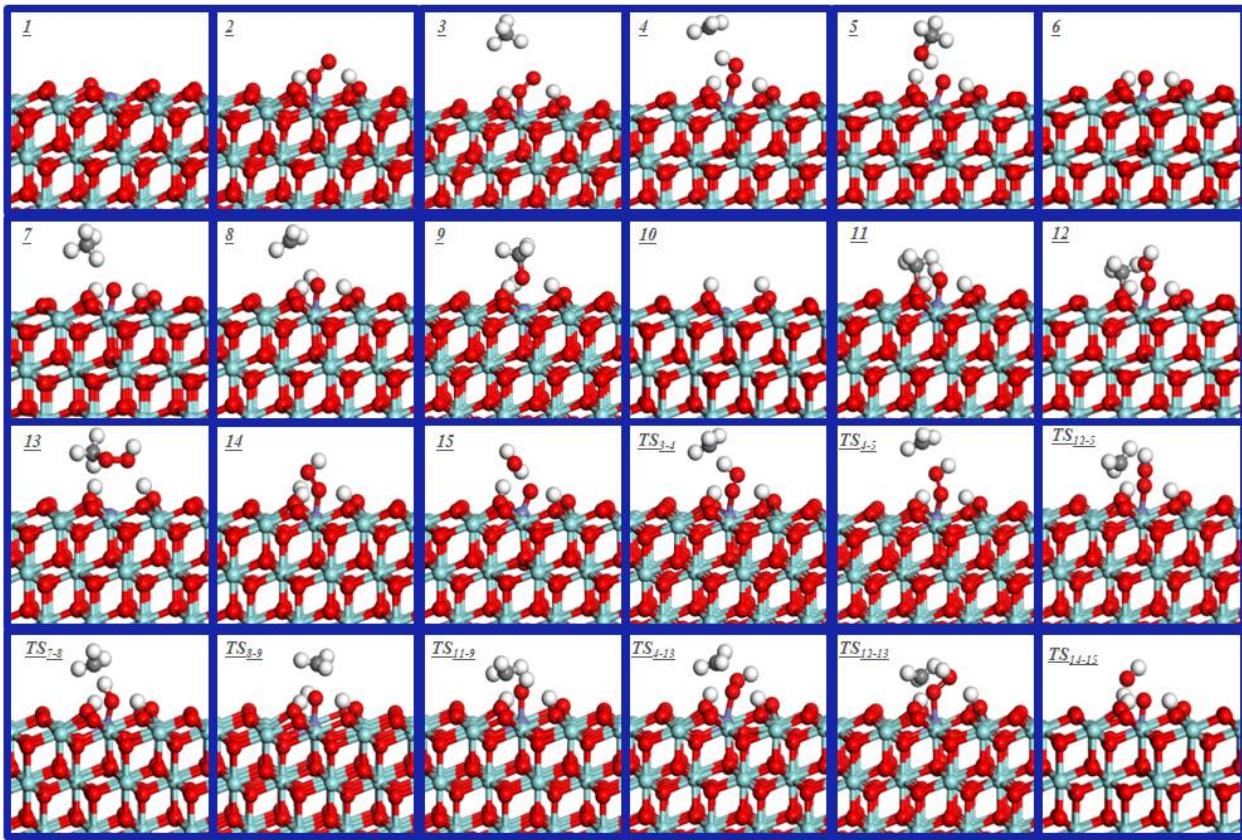


Figure S12. The structures of intermediates in the conversion of methane on Fe_1/ZrO_2 .

Table S1. The selected reaction energies and activation barriers for methane activation on Rh₁/ZrO₂ calculated with a 3×3×1 k-point mesh and only the Γ -point.

Steps	3×3×1	Γ -point
1 → 2	-2.96	-2.83
3 → 4	1.22	1.18
5 → 6	0.46	0.41

Table S2. The adsorption energies (E_{ads}, in eV) of H₂O₂ and resulted O₂ on Rh₁/ZrO₂, Pd₁/ZrO₂, Ir₁/ZrO₂, and Pt₁/ZrO₂.

SACs	E _{ads} (H ₂ O ₂)	E _{ads} (O ₂)
H ₂ O ₂ @Ag ₁ /ZrO ₂	-3.63	-0.43
H ₂ O ₂ @Au ₁ /ZrO ₂	-1.87	
H ₂ O ₂ @Cu ₁ /ZrO ₂	-4.45	-0.39
H ₂ O ₂ @Fe ₁ /ZrO ₂	-3.02	-0.61
H ₂ O ₂ @Os ₁ /ZrO ₂	-0.63	
H ₂ O ₂ @Ni ₁ /ZrO ₂	-3.98	-0.42
H ₂ O ₂ @Ru ₁ /ZrO ₂	-1.65	-1.03

Table S3.The selected reaction energies and activation barriers for methane activation on Rh₁/ZrO₂ calculated with different slab model thickness.

Steps	Slab thickness	
	(4 ZrO ₂ tri-layers)	(3 ZrO ₂ tri-layers)
1 → 2	-2.76	-2.83
3 → 4	1.17	1.18
5 → 6	0.45	0.41

Coordinates (in POSCAR format) of the Selected Intermediates and Transition States (see Figures S10, S11 and S12 for the numbering).

(Rh SAC) Structure (1) (E=-928.86 eV)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh

72 35 1

Selective dynamics

Direct

0.2378099909999989 0.0833299990000000 0.000000000000000
0.3956210252242371 0.0832161157182014 0.1219980247274819
0.0600336145827498 0.0825731870077178 0.2444845741563668
0.068999989999990 0.0833299990000000 0.0596800000000002
0.2239136775708275 0.0833148322541462 0.183628875893288
0.3886578485919188 0.0832072466991960 0.3095675894217180
0.2879399919999983 0.2500000000000000 0.0706599999999966
0.4604199945692500 0.2488010724363789 0.1905215511372518
0.1312894697169824 0.2503250453939856 0.3130314477670240
0.4567500169999974 0.2500000000000000 0.0109800000000035
0.1238489890306198 0.2509791565070500 0.1280255666957899
0.2946812091980107 0.2482046993659424 0.2480854327819273
0.7378099909999989 0.0833299990000000 0.000000000000000
0.8952335275918060 0.0830188346409102 0.1219967704924869
0.5589719797738226 0.0829511393110991 0.2452289538745518
0.5690000230000010 0.0833299990000000 0.0596800000000002
0.7240847695846213 0.0824555279575776 0.1842545083959877
0.8916081690394861 0.0825886093539552 0.3099160890429289
0.7879400480000029 0.2500000000000000 0.0706599999999966
0.9600118701236440 0.2484783766074088 0.1903487289928734
0.6323148749715912 0.2468875859158359 0.3147008870948653
0.9567499409999982 0.2500000000000000 0.0109800000000035
0.6250269181554344 0.2497878324414060 0.1278022896076862
0.7956945003459950 0.2449451247943131 0.2486148457638961
0.2378099909999989 0.4166699780000016 0.000000000000000
0.3949783533918350 0.4120935851290000 0.1214995073177008
0.0591478691836471 0.4163473365466359 0.2431751619913598
0.068999989999990 0.4166699780000016 0.0596800000000002
0.2267793954791841 0.4195038055225879 0.1851540968302388
0.3815086555180258 0.4066129468268258 0.3123171978237451
0.2879399919999983 0.5833299769999982 0.0706599999999966
0.4636516744416923 0.5834986182944704 0.1836691791374534
0.1304345195309082 0.5830182905688943 0.3117069646071400
0.4567500169999974 0.5833299769999982 0.0109800000000035

0.1189305276805754 0.5830348284947462 0.1280031532705195
 0.3046938673726416 0.5834017530361209 0.2509395460280217
 0.7378099909999989 0.4166699780000016 0.0000000000000000
 0.8947163975829042 0.4175896040760989 0.1221236570198059
 0.5596943874287632 0.4127580340644315 0.2446638626950417
 0.5690000230000010 0.4166699780000016 0.05968000000000002
 0.7291482082557934 0.4164816737744133 0.1857346458314311
 0.8926182586452924 0.4128309580289411 0.3086100762471489
 0.7879400480000029 0.5833299769999982 0.0706599999999966
 0.9489016228579246 0.5834539217822226 0.1944980412306876
 0.5723829785930263 0.5865690430442640 0.3263743778858483
 0.9567499409999982 0.5833299769999982 0.0109800000000035
 0.6289755192912949 0.5829338277522851 0.1267647501098565
 0.7705990779124292 0.5829504254531699 0.2633971917549687
 0.2378099909999989 0.7500000220000018 0.0000000000000000
 0.3939956901740658 0.7546282639509130 0.1217342820241853
 0.0590181257662223 0.7497601909051141 0.2431565953521542
 0.0689999989999990 0.7500000220000018 0.0596800000000002
 0.2261081287042828 0.7470966201728260 0.1847990064135132
 0.3815139053767993 0.7598675999186568 0.3121726973249110
 0.2879399919999983 0.9166700669999983 0.0706599999999966
 0.4598415182094371 0.9179044951133974 0.1898735843557589
 0.1314396507865538 0.9154723517380603 0.3129152556409522
 0.4567500169999974 0.9166700669999983 0.0109800000000035
 0.1247565711486516 0.9156915029393531 0.1277449035454126
 0.2946994618294667 0.9180560767557537 0.2477603336904082
 0.7378099909999989 0.7500000220000018 0.0000000000000000
 0.8943406844619446 0.7485846220156560 0.1217816309606761
 0.5595072654014217 0.7550101088770447 0.2441478538433586
 0.5690000230000010 0.7500000220000018 0.0596800000000002
 0.7283418628095646 0.7490184795366375 0.1854980548768950
 0.8927573824177912 0.7524715702782601 0.3088091489853966
 0.7879400480000029 0.9166700669999983 0.0706599999999966
 0.9593963851095353 0.9170601917249783 0.1898523206074714
 0.6320647784634588 0.9191241751022901 0.3147966598478433
 0.9567499409999982 0.9166700669999983 0.0109800000000035
 0.6257810200882261 0.9165994094936849 0.1276310741929549
 0.7954228775090471 0.9196265186818167 0.2486249470411011
 0.3878800130000002 0.0833299990000000 0.0353300000000019
 0.0518595957577830 0.0829292786260325 0.1572860502817193
 0.2194961540273468 0.0826427384474400 0.2779901522417347
 0.1378799940000022 0.2500000000000000 0.0353300000000019
 0.3020119640692727 0.2501651099213618 0.1564302766234249
 0.4673977950337260 0.2523007286562873 0.2782780764004045
 0.887880051000033 0.0833299990000000 0.0353300000000019
 0.5513042500829641 0.0829278169234371 0.1578438641879103
 0.7162087896297038 0.0820793914169329 0.2799416289842043
 0.637880051000033 0.2500000000000000 0.0353300000000019
 0.8023271725224319 0.2473927631312165 0.1563029443246720

0.9725264650474799 0.2493907511476863 0.2782972163521293
 0.3878800130000002 0.4166699780000016 0.03533000000000019
 0.0502499990000018 0.4166699780000016 0.1546799970000023
 0.2181745342317143 0.4155638641898491 0.2779347223476023
 0.1416015404137596 0.5824252627912969 0.0348837946089589
 0.3077440222044530 0.5831816166936861 0.1579254903160390
 0.8836972898738225 0.4163834123648300 0.0360361871025106
 0.5502499749999998 0.4166699780000016 0.1546799970000023
 0.7166924072959731 0.4016209300432507 0.2755321153733519
 0.6407537145371052 0.5843670345621277 0.0346355546777559
 0.8002499749999998 0.5833299769999982 0.1546799970000023
 0.9690301744524561 0.5830066485285030 0.2799857718409484
 0.3837832794957450 0.7499220242954650 0.0361788473934226
 0.0502499990000018 0.7500000220000018 0.1546799970000023
 0.2180481581873153 0.7513678886634452 0.2777407182380784
 0.1415565521053281 0.9172540276776147 0.0343616804037055
 0.3002499939999979 0.9166700669999983 0.1546799970000023
 0.4666567854159283 0.9145343020150634 0.2776520198752621
 0.8853600021914971 0.7495052376809568 0.0356784396630516
 0.5502499749999998 0.7500000220000018 0.1546799970000023
 0.7157570169576246 0.7637381767662106 0.2758398403925710
 0.6411181838897306 0.9178410362616560 0.0345897906102905
 0.8002499749999998 0.9166700669999983 0.1546799970000023
 0.9717224680698777 0.9159143173342841 0.2778713600424041
 0.4551946149506989 0.5839863884994898 0.2870431997889682

(Rh SAC) Structure (2) (E=-949.79 eV)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H
74 35 1 2

Selective dynamics

Direct

0.2128519425909423 0.0799407939642694 0.0023141661249831
 0.3858301261032276 0.0813056269416405 0.1297930576109028
 0.0509846911650519 0.0774337404073161 0.2479988230045983
 0.0484869369323018 0.0775936056639743 0.0683933843055530
 0.2147917033888630 0.0817012755647004 0.1892645223151418
 0.3852883603799774 0.0764787277832947 0.3122602562146314
 0.3006436032848307 0.2429925831219570 0.0667881021977658
 0.4748570277538216 0.2525249331458576 0.1921240124115807
 0.1323168777764622 0.2419408479641169 0.3118124435859941
 0.4677266609772416 0.2488705556031947 0.0030124127737224

0.1355316415204512 0.2465825932993957 0.1255626599737127
 0.3044928633897726 0.2489505659576775 0.2470916474079443
 0.7148310840141024 0.0795064252631588 0.0042285752327897
 0.8818135654162972 0.0809094282434503 0.1263178111630369
 0.5516943819862664 0.0794770968428868 0.2490800415228668
 0.5464514494966159 0.0800481378366913 0.0676576870998266
 0.7171978987093858 0.0791120098056169 0.1903401181809082
 0.8856608037898389 0.0799731553006415 0.3134301776842873
 0.8009803571884864 0.2478807311045772 0.0667552943774988
 0.9681530499070026 0.2448010903067215 0.1882630577627225
 0.6379205195211504 0.2444301762729632 0.3123582812473528
 0.9670757934951728 0.2446813990088569 0.0025923379294189
 0.6356780329974868 0.2446707819857784 0.1256590738220114
 0.8038743454282778 0.2469681669861621 0.2482051188688973
 0.2141681727280471 0.4127493554710495 0.0045966482890566
 0.3810673383589915 0.4083323444852907 0.1275378238498613
 0.0489819514915568 0.4109118093450141 0.2485464901374014
 0.0450607418602757 0.4122523393478101 0.0683441659714400
 0.2127320002575052 0.4128518312424422 0.1891593176607803
 0.3553179641900401 0.3629214442119991 0.3298372362571205
 0.3014762376264580 0.5787696416013416 0.0684814873244321
 0.4674572083027043 0.5806918958098027 0.1843515233592256
 0.1309153597948060 0.5786501776361032 0.3128376999131756
 0.4666345735769430 0.5793286275544596 0.0033769692426197
 0.1340307816407517 0.5795703910568224 0.1258370937239797
 0.3015138882047652 0.5693012774569312 0.2516552137668842
 0.7125819943428304 0.4128761381010057 0.0033287355892815
 0.8789425682059223 0.4137201704276522 0.1284900848244380
 0.5430484225779511 0.4292401544249860 0.2626405722654953
 0.5476359046243322 0.4149146536962981 0.0700675768148238
 0.7081652956272139 0.4093443130621401 0.1926838189934265
 0.8855763873139477 0.4125207989764848 0.3128320281673068
 0.8013404044167020 0.5792602865857198 0.0660492052906878
 0.9685130164266239 0.5790881965153110 0.1895340180499279
 0.6823743000084054 0.5844348956977556 0.3281128772814298
 0.9679665966540033 0.5794934527229100 0.0024432128967444
 0.6396235840540363 0.5797807111586187 0.1269558754062119
 0.7996174446644205 0.5798303873224431 0.2467163697584376
 0.2164355103188321 0.7459183024748539 0.0045034837332571
 0.3817654718342894 0.7500502266801675 0.1266967803822630
 0.0523601322036688 0.7472080531188697 0.2475995506396122
 0.0481315208373211 0.7475564084487981 0.0674510450122613
 0.2189344169083111 0.7416021436743226 0.1905059424737771
 0.3803725053137707 0.7556819411562907 0.3106763680604052
 0.3009270519393268 0.9175889732775860 0.0669289932130105
 0.4711454505577107 0.9095333636415068 0.1902117592652439
 0.1375091277924206 0.9125201965291512 0.3124964702882220
 0.4677230158973194 0.9112909487077641 0.0031499506095948
 0.1375096639639916 0.9104891558459678 0.1269464749670666

0.3014894779972984 0.9152074095773136 0.2464299571428789
 0.7139061606051288 0.7463958522670422 0.0032930581006839
 0.8839014659442265 0.7438755287108104 0.1268025845161778
 0.5587291259123216 0.7418637228153934 0.2516886004204595
 0.5489416653000707 0.7448237434040896 0.0692090223293613
 0.7177452186386644 0.7508833725952222 0.1891077174208443
 0.8893728946327119 0.7471227277357636 0.3123392938521475
 0.8013443420913610 0.9113015273303575 0.0670719976384875
 0.9682535015097621 0.9126798572848132 0.1874043421942908
 0.6402708576522456 0.9153404463117882 0.3129094015541604
 0.9666627792442678 0.9135072075105034 0.0022069116178309
 0.6352254738560390 0.9157484744664262 0.1258401310677953
 0.8066394880257468 0.9143289204204091 0.2480512303804260
 0.4501383420448224 0.5661457156399398 0.3710642895076290
 0.5314725601749938 0.5769900348062635 0.4031337613007838
 0.3845222964382028 0.0801587449999169 0.0367234583691729
 0.0507886694735459 0.0791508655999359 0.1576410998043101
 0.2190886164415051 0.0785647915907720 0.2791324015740860
 0.1329993667830140 0.2448792503071912 0.0359175784195735
 0.2993561729009530 0.2465410609401517 0.1582875580451018
 0.4691967207608627 0.2418291757175927 0.2805629553821799
 0.8837119059786193 0.0794729242667745 0.0360494460618726
 0.5523796717282248 0.0805863882975510 0.1583255270870583
 0.7203600254097646 0.0791835359354151 0.2797715811268640
 0.6328848976371033 0.2468007436960325 0.0365994274191338
 0.7991079816494726 0.2460613422134230 0.1577715481012902
 0.9675554756236675 0.2434709019444145 0.2793247941670878
 0.3836610986774472 0.4129573571409140 0.0373194419600819
 0.0495572129211660 0.4125794400395985 0.1574675990628849
 0.2095289905242738 0.4099290046665721 0.2792181060553411
 0.1333758545194789 0.5795361650132501 0.0369834925665690
 0.3026666484391176 0.5780459722720569 0.1595342407632245
 0.8828949519613950 0.4131317040439621 0.0364113125864088
 0.5487401854812786 0.4172566980542836 0.1589139744939806
 0.7207493731837167 0.4102113588453936 0.2809198590695103
 0.6334662992108302 0.5802253750370817 0.0366386676023872
 0.8003103534686523 0.5807667179064594 0.1582070478965222
 0.9667499503900773 0.5797727926169109 0.2795501105835931
 0.3841742670749613 0.7461039767558116 0.0374416405537437
 0.0514351470407162 0.7451270442190410 0.1576801354587719
 0.2186434867900089 0.7433989896166915 0.2788947237698597
 0.1339003366336261 0.9133639843822305 0.0361801231138481
 0.3012836639749144 0.9128909445857295 0.1581744132296029
 0.4691996995254706 0.9109014784634012 0.2787573866696386
 0.8845375642336752 0.7457523419123330 0.0359004313056102
 0.5513947246635802 0.7443315729341649 0.1593331411013850
 0.7246254479814375 0.7531782927328022 0.2792307207958735
 0.6326537050150899 0.9122863393457503 0.0366345837899113
 0.8013641845689218 0.9133769901241302 0.1567080005190880

0.9716507660839959 0.9125582665456761 0.2788935630452948
 0.4640870173710530 0.5918225255629356 0.2862048975743313
 0.3757645202648714 0.4094107246715803 0.3621373619410182
 0.6376994838164345 0.5846602272853713 0.3613693805927644

(Rh SAC) Structure (3) (E=-973.83 eV)

1.0000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2147501401424047 0.0789334788907662 0.0009071011118516
 0.3864550603280903 0.0785263791037440 0.1274254609884563
 0.0522579204552058 0.0761322697282255 0.2458953536502942
 0.0491146902440489 0.0757335039701047 0.0659575201294147
 0.2154938723374210 0.0813278637469125 0.1868553510725137
 0.3858436453149415 0.0750232152130972 0.3107699533438248
 0.3006682590773098 0.2426519351090089 0.0660599705464559
 0.4723097839215992 0.2484964129889348 0.1902463352653870
 0.1318134352861545 0.2411176242621451 0.3105298760594689
 0.4669217883588540 0.2470231188209183 0.0017646383350200
 0.1340143921361780 0.2450935913650824 0.1235829914666494
 0.3039177522434517 0.2476866457487308 0.2461390279011659
 0.7153688516662532 0.0777932609543798 0.0022849301619633
 0.8827737743176374 0.0791439245319375 0.1240830952078953
 0.5526273270942673 0.0771737270085080 0.2473701731346114
 0.5477534927048129 0.0784651458655496 0.0659362708519529
 0.7182208730530579 0.0770086213807787 0.1884863022525764
 0.8868483074133026 0.0779699798670635 0.3116122545094892
 0.7994527197488582 0.2460404586883761 0.0655032186993550
 0.9671926350152619 0.2430040780397498 0.1868295336211327
 0.6378720071420939 0.2420370697866055 0.3117547200867870
 0.9661005733019318 0.2435524146450614 0.0012968153355408
 0.6344905038847793 0.2432323060718558 0.1250319791531225
 0.8032676140670006 0.2443621825017363 0.2469851958019933
 0.2149859878079279 0.4108450113219735 0.0026711574747319
 0.3831044923100624 0.4091435538919191 0.1264296612826206
 0.0494405610393841 0.4094481240265346 0.2463387203977333
 0.0460669303071441 0.4116386566158919 0.0660278939649904
 0.2131142739375023 0.4097578785400457 0.1868834317026504
 0.3583635289048095 0.3664890220928521 0.3272398033533566
 0.2999261850441703 0.5770513837958572 0.0670065158873164
 0.4659264649485750 0.5801356874052731 0.1863171426962304

0.1294217331433865 0.5769091767430121 0.3115884139586194
 0.4660088083375572 0.5775677184730547 0.0022357357588060
 0.1330955907157639 0.5781296452064599 0.1246487700795563
 0.2969562120306601 0.5686287485835956 0.2490826089036542
 0.7131996454211730 0.4113948990987590 0.0016733430148699
 0.8804370677122717 0.4117487741037337 0.1260414321456068
 0.5470970042548489 0.4221885875392539 0.2574010695414096
 0.5486235989652100 0.4127093506842048 0.0684767387975256
 0.7118029298505368 0.4074775824278027 0.1902546197778743
 0.8868200985574093 0.4097940598745284 0.3109411072735148
 0.7993234849974090 0.5777637104241836 0.0653113590537275
 0.9670657398970338 0.5774385512939459 0.1880410157775267
 0.6908519196498670 0.5805728973497961 0.3287484860548390
 0.9658965977446590 0.5782056416826232 0.0010456774478068
 0.6367761604119465 0.5776133293737794 0.1266447483853352
 0.7981991396313363 0.5781631661665791 0.2454776020301175
 0.2170586113445585 0.7441730604111428 0.0023849652590285
 0.3832656725164309 0.7469479103555897 0.1250509850177805
 0.0522766293513066 0.7456124486159220 0.2454330435234801
 0.0491654152368534 0.7458243120203598 0.0653697864797228
 0.2191670541591791 0.7416910549878908 0.1882668618494186
 0.3766559876651297 0.7559632135962008 0.3084213921894722
 0.3001728112012790 0.9148247374044495 0.0655349730336485
 0.4697677475450012 0.9072608060694892 0.1892813472299010
 0.1364309162655453 0.9115213410072364 0.3110011927497351
 0.4672083651619325 0.9098450300061233 0.0019630359128187
 0.1365184866633856 0.9095020649417990 0.1253240157473040
 0.2998466907002020 0.9157963607741616 0.2444891839913047
 0.7144959540641146 0.7446809729885152 0.0015368072995004
 0.8849961466091724 0.7424313150587672 0.1247131092644682
 0.5616756018998842 0.7418887114964479 0.2505307801242918
 0.5499686368175588 0.7432471103443727 0.0675687282356409
 0.7194298430764561 0.7487726921087637 0.1870286963206824
 0.8906919679651363 0.7457901175746077 0.3108358627244456
 0.8001469410230825 0.9097744152963119 0.0658307297147080
 0.9674072972356895 0.9117065636541338 0.1859912773177736
 0.6406340444804540 0.9145573343759288 0.3122777616532006
 0.9654406639995978 0.9115472753386378 0.0006603561386990
 0.6341784031379260 0.9135399707222961 0.1248481432049045
 0.8060105173642281 0.9121941112107208 0.2468448393286043
 0.4756113386585361 0.5617691747245689 0.3622948371337520
 0.5088860635060645 0.6528322794993544 0.3911283093289928
 0.3844343386216479 0.0784943879552987 0.0353092937116610
 0.0508377577770191 0.0778089085436863 0.1554629963612928
 0.2188175082904235 0.0775974698606540 0.2770732536488097
 0.1332213692476721 0.2438476337671429 0.0342890939877711
 0.2998894166305386 0.2452163024400368 0.1566334396463955
 0.4698398103134605 0.2380428036845348 0.2786864362172984
 0.8831306155786303 0.0776589714352760 0.0341577921813011

0.5523032630895731 0.0781540880178606 0.1567165036889353
 0.7199934879117474 0.0766052625481442 0.2785276074155723
 0.6327304079761902 0.2454836753708413 0.0353631735913314
 0.7994412523938798 0.2439926254490696 0.1559342080049819
 0.9679846380589739 0.2414409866325753 0.2775520719887942
 0.3841644140719915 0.4114768017286389 0.0360518027043917
 0.0491259383580004 0.4108265538888113 0.1554860226081711
 0.2084031218513761 0.4086091248186308 0.2773780258866883
 0.1335862298699214 0.5780400444132766 0.0352587745520564
 0.3013201556417578 0.5768543724903749 0.1578438327453860
 0.8822655525058976 0.4117167829903530 0.0347525442321449
 0.5492313209233672 0.4148297844415191 0.1589401757746976
 0.7225989313586363 0.4065680704822316 0.2790884753763715
 0.6332096027940266 0.5782331796415437 0.0356145482531172
 0.8002417868874339 0.5787214583034025 0.1567224647292002
 0.9669128928803178 0.5785200387728376 0.2779678731453192
 0.3842242702341073 0.7443820426016446 0.0358811749815315
 0.0508663193455227 0.7439509689064593 0.1559314417741972
 0.2180780402483710 0.7437920823920525 0.2772513766714277
 0.1342167058258372 0.9114656968373839 0.0345706080726669
 0.3012955437082191 0.9111578028055349 0.1565064233815095
 0.4684862687160381 0.9073728100271451 0.2779086803561077
 0.8838932544070185 0.7441593678607291 0.0341896950629506
 0.5518440801549014 0.7432550494611486 0.1584881936669497
 0.7250749564260776 0.7519971501970536 0.2778683962396855
 0.6328878462879967 0.9105170099864679 0.0351339668804877
 0.8016610819809249 0.9116322325368392 0.1551279272556881
 0.9718838497588441 0.9112435520071330 0.2772471487642659
 0.4609522041998729 0.5848119716447181 0.2797284998279206
 0.3774111682454780 0.4073737982706525 0.3610314348973130
 0.6587139910607196 0.5854170641322627 0.3644482872475765
 0.3733736570119982 0.5811148135149371 0.5300491609286798
 0.3277123534035948 0.6986241049094729 0.4843214483317814
 0.3884046172299524 0.7417631086740738 0.5470783251522586
 0.4667335557823700 0.6751897345958351 0.4939364449927021
 0.3890810354153770 0.6741917723729969 0.5139048078419804

(Rh SAC) Structure (4) (E=-972.66)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
 74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2117651713193522 0.0780406665210601 0.0005335063904925
 0.3866952361036108 0.0796630636870169 0.1296185083444248
 0.0509464867730993 0.0757371508194133 0.2471143506758651
 0.0489029234003009 0.0763395928874908 0.0678374907469321
 0.2152801736272169 0.0803162558386666 0.1887557274254824
 0.3843580412255899 0.0747742265126173 0.3116583877824299
 0.3012049212347619 0.2392882836950573 0.0652301779934013
 0.4772168619929471 0.2527294277910293 0.1912911000236575
 0.1340949194274200 0.2408340878928570 0.3104847951674419
 0.4683582952876906 0.2469775032610128 0.0013407449386174
 0.1372226989864789 0.2455346421804536 0.1246908386304178
 0.3061921331449743 0.2486485559848651 0.2463376132440228
 0.7151110240489882 0.0778069400243309 0.0031784630152786
 0.8813471220390989 0.0790830508875045 0.1254310529856245
 0.5504838330075501 0.0776098699052571 0.2484683201863990
 0.5460746078152993 0.0780390751001649 0.0664549475709858
 0.7170393393266189 0.0773289530075864 0.1896749020333228
 0.8853285685828661 0.0780555789383506 0.3121720993434471
 0.8022231675022482 0.2464496977940948 0.0652998371164724
 0.9691081424748359 0.2433719475762452 0.1868175466557198
 0.6392660830695660 0.2420937255080949 0.3109162080703971
 0.9681423626708163 0.2422751931473730 0.0010848215739155
 0.6368060816267632 0.2418700073858811 0.1238839720715620
 0.8048771987835727 0.2454250218682347 0.2466844302474872
 0.2148987376659850 0.4108064683801130 0.0035631935042483
 0.3805036613616087 0.4044945722062317 0.1254108204585338
 0.0501296267681424 0.4090941376601241 0.2473451308330291
 0.0450394793891638 0.4098932987371448 0.0671568851514936
 0.2139360802800811 0.4132530695077093 0.1884198250374028
 0.3565819995084879 0.3669432510899134 0.3298983239275267
 0.3030388920368917 0.5771842669786020 0.0669796407874474
 0.4688492840186158 0.5777072810622668 0.1793862489978025
 0.1336778889035405 0.5770706378562082 0.3108826315644964
 0.4675857172264940 0.5779773523940465 0.0018771466217490
 0.1349656705662742 0.5778074166353319 0.1239176902633846
 0.3073567201049909 0.5686070406551814 0.2500201986844320
 0.7132699128239793 0.4109423185520394 0.0019257066483740
 0.8786740242337503 0.4121070335942751 0.1276816152618801
 0.5405532942897490 0.4303352352479030 0.2652891997656145
 0.5481033038026503 0.4129542292276547 0.0682352792269598
 0.7060221658814170 0.4073934810105101 0.1919462151323392
 0.8869193733857752 0.4104676288343333 0.3113762712163310
 0.8036673576852679 0.5775801680683220 0.0639492990472941
 0.9704092417562581 0.5773098667571310 0.1879640372331088
 0.6917585109043729 0.5797809415316102 0.3283122457179709
 0.9701440448853428 0.5781966471545998 0.0007513045277404
 0.6425735614301727 0.5776769289852116 0.1246467430017990
 0.8017539792262466 0.5777933379272562 0.2447832337766246
 0.2165113109412126 0.7445368182829801 0.0036048752852822

0.3812024544327486 0.7502449141209965 0.1253395360706562
 0.0518357904910736 0.7458928728560134 0.2464325017342740
 0.0477716733827846 0.7465085038773936 0.0665813838129337
 0.2188207880482624 0.7385336371475333 0.1893563389006563
 0.3754742954593229 0.7536724606201353 0.3123898477193633
 0.3016214906748292 0.9173270830440804 0.0654935463061292
 0.4732787382078976 0.9062381597222711 0.1897230989236600
 0.1382736817131426 0.9108638617039083 0.3113067160366479
 0.4684865667276039 0.9089178555184446 0.0016325119561994
 0.1387137670475033 0.9089487601585865 0.1260131409020919
 0.3029685269313385 0.9125183808055642 0.2451322769075804
 0.7140090077026094 0.7448270629812838 0.0019413588728115
 0.8832116931199860 0.7421274200723166 0.1260703384188385
 0.5566630560435394 0.7358571119719390 0.2526794268507869
 0.5492650839120234 0.7430669988961845 0.0683339999541481
 0.7160160036318458 0.7486542828278202 0.1885325119539897
 0.8898045102978176 0.7448161279258467 0.3113063693435303
 0.8022269130646686 0.9092992835821130 0.0657219370790701
 0.9687212185005194 0.9112164199978269 0.1859971105410906
 0.6404062864533780 0.9133085590700903 0.3114674525897531
 0.9676626749226613 0.9125633890517109 0.0009590886850876
 0.6361151697083604 0.9145486539210617 0.1245760804358268
 0.8068213107933346 0.9110446434320156 0.2468042640061610
 0.4950053033304012 0.5613590259404887 0.3676768510675210
 0.5053071971194062 0.6683399566884319 0.4027618048002625
 0.3854275092334527 0.0783025495266530 0.0353443589935243
 0.0514234747794592 0.0775690695648074 0.1569277605145024
 0.2204617471688676 0.0768677608305702 0.2783497649033976
 0.1335614762686557 0.2425886579055179 0.0347628014670307
 0.3000929455396993 0.2449333326631823 0.1574023118097827
 0.4703484474619504 0.2431938960604328 0.2797136397578240
 0.8845259114626018 0.0778241459153582 0.0350743352510704
 0.5528313048061968 0.0786230908561168 0.1578023745152256
 0.7207402527304900 0.0770393163638243 0.2785750569806029
 0.6337358368490963 0.2445125313984204 0.0350838676163444
 0.7993829970545602 0.2443902782662009 0.1567709433374890
 0.9678195069091891 0.2423559561182286 0.2778271307930334
 0.3838420724420718 0.4107049099305432 0.0356376288339284
 0.0506822638052828 0.4112348939497302 0.1562753840436621
 0.2108340509190250 0.4084383765818193 0.2781429514818654
 0.1334547713858470 0.5780999267350624 0.0355537212244194
 0.3041375674824019 0.5765658033495545 0.1572911261755308
 0.8836841047670213 0.4111844687876442 0.0350792599671364
 0.5494046655235783 0.4153248012332325 0.1559650767878905
 0.7198294542254351 0.4090098561887443 0.2798743706238059
 0.6344517300232995 0.5788573559141408 0.0349636899421879
 0.8009453042551192 0.5789965896096979 0.1569132724145841
 0.9664510340928656 0.5777716569993111 0.2780390401619560
 0.3849984724725474 0.7447395599140263 0.0361841785551817

0.0522217819075702 0.7433774135476895 0.1565474154568453
 0.2180693956987017 0.7429126495039036 0.2777232115356271
 0.1343971453179062 0.9122507405597767 0.0350197956291944
 0.3018703964506713 0.9114333329965585 0.1571632027731027
 0.4697600276270069 0.9079236602651033 0.2783551893406336
 0.8853045439603687 0.7443181149144190 0.0346795969417686
 0.5518988719107718 0.7415528132536983 0.1584585814748395
 0.7236383753068504 0.7495595264250000 0.2786483979960749
 0.6329826986289765 0.9105501311656296 0.0356468621275601
 0.8012955570242956 0.9112391552897738 0.1557414921166957
 0.9709281085431696 0.9106990373578793 0.2775598942431958
 0.4545460021539278 0.5911103232747716 0.2904501897052005
 0.3838311502164701 0.4175625146196917 0.3597052129821995
 0.6293525543147546 0.5740346380111211 0.3525972445472864
 0.3814806125896337 0.5752912775408320 0.5120768449518017
 0.2859850035520929 0.6978645059874277 0.4878892492843570
 0.4200693518121085 0.7436371537218288 0.5149042925633183
 0.4405028064389973 0.6643066477951310 0.4256855187997219
 0.3645362656217802 0.6718364386215453 0.5022906576028577

(Rh SAC) Structure (5) (E=-975.59 eV)

1.0000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
 74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2116869593032837 0.0782525560923856 0.0009240695520921
 0.3876900070528146 0.0804967265877791 0.1309870234155850
 0.0510733016419973 0.0764557592015952 0.2479424679608224
 0.0497539389186358 0.0767141618622163 0.0689735160028747
 0.2155174556621962 0.0804929535809448 0.1895263724724578
 0.3843320526948053 0.0757409684324376 0.3125202364759957
 0.3023746907491462 0.2388953833722682 0.0653142311665494
 0.4799440890531597 0.2549857666052797 0.1923049325803391
 0.1355663925607503 0.2408171007674753 0.3110145784073172
 0.4695207016265068 0.2471433561840960 0.0013690172707025
 0.1390288498766118 0.2466067785241117 0.1254406976564701
 0.3075871363645264 0.2489859507436107 0.2461142428354094
 0.7160238411307601 0.0779304531054085 0.0038457310349423
 0.8813558517685797 0.0797265005518467 0.1261740854755806
 0.5502286246120834 0.0787507987222131 0.2495150391708274
 0.5464108756403420 0.0788480048870255 0.0671082921361542

0.7172141994680495 0.0783233214255769 0.1905673218802450
 0.8852968373002591 0.0786183105697567 0.3128905436831694
 0.8037492593942354 0.2470988561277346 0.0656095290812822
 0.9702415143489157 0.2439333397839379 0.1871600601986795
 0.6403271164719263 0.2433958377923758 0.3114005656932176
 0.9696678047094287 0.2422562477885688 0.0016012089831237
 0.6383084998193821 0.2422682947438930 0.1239172121462982
 0.8060583307155154 0.2464608347666406 0.2472482216242571
 0.2157679124979503 0.4114107167269473 0.0042821582595462
 0.3810731055522716 0.4035431222773014 0.1254438565708625
 0.0510728109914649 0.4086785235390787 0.2482274860840319
 0.0456013273989913 0.4100930364433458 0.0679909872339190
 0.2153170736784482 0.4157718976804841 0.1895317903663933
 0.3542737609181988 0.3663488444359811 0.3311546766897640
 0.3051483650959701 0.5775745081086531 0.0674555287236591
 0.4710284063243709 0.5773941427796446 0.1776100144249589
 0.1361654964479262 0.5780536504493420 0.3100267826492775
 0.4689030882029275 0.5788433605699287 0.0021224259138591
 0.1365838538422819 0.5784796883768439 0.1240709132023973
 0.3158777030911281 0.5669994340943280 0.2514257823085378
 0.7144740738644054 0.4113798220247641 0.0023445027323982
 0.8787865083042666 0.4126844102318941 0.1285380000825191
 0.5381445157375800 0.4334317806797948 0.2688692427545799
 0.5488726186562523 0.4131232926638376 0.0680865287255353
 0.7047671397620535 0.4077517659189174 0.1932017801131041
 0.8876606515050035 0.4113395088932390 0.3119258800872665
 0.8059065725928911 0.5782892833789269 0.0638882888389346
 0.9726296342104456 0.5773378710643101 0.1883945334131555
 0.6986600122863850 0.5814855161663626 0.3292587388183486
 0.9724228845972390 0.5786770791574309 0.0010922729975559
 0.6451455545366935 0.5775609989097272 0.1243429754835502
 0.8037701762791202 0.5782408693779489 0.2445677539960352
 0.2175625553500259 0.7452079148183667 0.0045311327123335
 0.3814496474964857 0.7516351823136833 0.1259883120752470
 0.0520661734555120 0.7471896067212540 0.2469094448795882
 0.0482321873662704 0.7473174781413628 0.0672501498115402
 0.2202346041764675 0.7366137750846145 0.1908636633495226
 0.3736426797597234 0.7561333709524535 0.3142410804899309
 0.3031278632318811 0.9188276177444188 0.0659687250611383
 0.4755457989059459 0.9064669510961494 0.1904164765765924
 0.1394493538372664 0.9112013616823198 0.3115020834962243
 0.4700719286077725 0.9092210124470491 0.0020877587118003
 0.1406601872678163 0.9083835577314379 0.1268243451823923
 0.3047417602628406 0.9130182456692324 0.2456096860303486
 0.7145979761604814 0.7455245175735169 0.0024639315461075
 0.8838187290744471 0.7423699650053156 0.1270524688460458
 0.5553118073468186 0.7339242024343151 0.2543214904631335
 0.5500286260064445 0.7433273038554653 0.0691602864167892
 0.7156292999855495 0.7490379022347065 0.1892640960403543

0.8906593431705812 0.7455423315476768 0.3115478231339541
 0.8038948387247363 0.9092903735475794 0.0662274122874453
 0.9698875238772540 0.9119622056285783 0.1862510043458898
 0.6410642397049691 0.9135764984185148 0.3117138790443048
 0.9692170916203121 0.9135088380699929 0.0014444325311276
 0.6374804842015004 0.9157310856666994 0.1249424875667266
 0.8075999877461308 0.9117823756805964 0.2471072831297770
 0.5088654276348530 0.5869402010892063 0.3629497462724187
 0.3944242657725278 0.4510046985186329 0.4330531809396085
 0.3867968644831996 0.0789377191282693 0.0356469434539493
 0.0522595987861007 0.0780603889858175 0.1578013103794557
 0.2216955767435150 0.0775689732592286 0.2790941677741223
 0.1344502419331372 0.2428177184386634 0.0353641865238316
 0.3009928084736094 0.2453840690377322 0.1579664800744527
 0.4703942073789008 0.2454312407654359 0.2809058946529242
 0.8857082423825006 0.0781999361957042 0.0357689530962930
 0.5538121183697180 0.0796619815721026 0.1586804985803367
 0.7214620010396848 0.0782282805812812 0.2792015447501061
 0.6349762701329347 0.2446645359918960 0.0352220062452921
 0.8001273602979270 0.2450986878762304 0.1575158838004528
 0.9685436150210061 0.2430035537758229 0.2784509394250440
 0.3846718457883859 0.4108798463412038 0.0357541917300145
 0.0522778730237247 0.4118163116180793 0.1571021163586789
 0.2128186069138473 0.4080077345134254 0.2793652954593754
 0.1343382706120418 0.5786846149804974 0.0360537462506757
 0.3062419272229723 0.5767055467969323 0.1575822208264866
 0.8849495949827832 0.4114497242186554 0.0355541579706713
 0.5507443299289798 0.4153546056523268 0.1550700741603340
 0.7204974713282208 0.4106323628991413 0.2809536893062367
 0.6357631240739678 0.5795565169518326 0.0350154796848048
 0.8020661840645655 0.5794351354190082 0.1572329497764353
 0.9672910036813227 0.5781595681950527 0.2782596635579898
 0.3862690156576688 0.7453629297828133 0.0367967284030414
 0.0536568313598630 0.7435116165960582 0.1572238850453828
 0.2178183412081965 0.7444254876906947 0.2787765258420263
 0.1355642619777069 0.9129558172760068 0.0356202128016965
 0.3029442589421584 0.9121107602432876 0.1579108097808472
 0.4708821994317991 0.9092426984401559 0.2787566066813694
 0.8868521437248843 0.7449448751074662 0.0352458688349577
 0.5527537221522645 0.7415081857448700 0.1590510958550480
 0.7242751323843117 0.7495586654993959 0.2789507672895623
 0.6339284003011231 0.9109252838552020 0.0363089572150542
 0.8020131400980061 0.9118315412981380 0.1563040925673386
 0.9710335865752302 0.9113108865743151 0.2780149570530071
 0.4507557058317788 0.5906115522130113 0.2976829808311107
 0.3644989992034652 0.3857872435068571 0.3704190249827284
 0.6316499121048595 0.5829399812906599 0.3512991925007396
 0.4658397061307412 0.4704793799692709 0.5092056890335894
 0.5253947335462391 0.3555163336799796 0.4662563542855416

0.3982681866197734 0.3277668912999315 0.4962013704856463
 0.4402908041977944 0.5140727613561822 0.4154305374890124
 0.4496358318862461 0.3990883495400325 0.4782974598694040

(Rh SAC) Structure (6) (E=-944.91 eV)

1.000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H
73 35 1 2

Selective dynamics

Direct

0.2122904126445917 0.0784968082957687 0.0011852716983535
 0.3876572288159514 0.0799609772781421 0.1306318670759097
 0.0513333381444157 0.0761912833109662 0.2479552506258103
 0.0499003228674184 0.0765724626273303 0.0688358518390653
 0.2158551980700549 0.0802244419098568 0.1895627816539474
 0.3851603496769965 0.0749796880119234 0.3120323491998231
 0.3023619528931186 0.2394129708916460 0.0657588715685175
 0.4786321072620823 0.2535964571774904 0.1920083837521193
 0.1351423323236062 0.2408392556579675 0.3110112246967995
 0.4695738523242071 0.2476079099818239 0.0018833600553197
 0.1384657114294326 0.2460760380949241 0.1255485278984401
 0.3069927772042988 0.2484870793671367 0.2466485071817781
 0.7161941682260873 0.0781976456712965 0.0039982413993354
 0.8819856770766444 0.0797439648355769 0.1262360023281023
 0.5513860194529859 0.0789062932152249 0.2492324835843130
 0.5468697390196859 0.0789856646435903 0.0671827065044766
 0.7178149127076503 0.0780857655276108 0.1904445694664729
 0.8856959007299279 0.0787090037560500 0.3129673654211211
 0.8036397884811829 0.2471453361883105 0.0659216995594280
 0.9700865313230881 0.2438062822396505 0.1875009407749227
 0.6396967807919191 0.2440072435883972 0.3113770098546946
 0.9695289916367865 0.2423770743424571 0.0018247279951522
 0.6381531824592845 0.2426199009022565 0.1244067167957542
 0.8056609753413708 0.2462609578033630 0.2474660402746453
 0.2158330570824581 0.4113507596501862 0.0044504529949854
 0.3811727889627666 0.4043540928602254 0.1260245218145372
 0.0508693769825000 0.4092269147464200 0.2482791094765278
 0.0458419052732681 0.4100630119008254 0.0680576885687264
 0.2149730721191152 0.4143006140585309 0.1893770645228025
 0.3558069680660852 0.3631407674206364 0.3309951373526917
 0.3046055973464575 0.5776724343879113 0.0677434953296382
 0.4700674021795985 0.5784246562608578 0.1787468474654243
 0.1352282051380241 0.5777548808262468 0.3109257746639841
 0.4687505142655690 0.5786921019210889 0.0025064575766973

0.1361166721545077 0.5781576748683446 0.1244932340167918
 0.3114099796309188 0.5679676033628953 0.2511843214983502
 0.7143421046465835 0.4115618973259230 0.0025970243731608
 0.8793331740549991 0.4127348873542105 0.1285944295492393
 0.5393683453889686 0.4328048576136250 0.2658038667235362
 0.5489832116190047 0.4135596869375803 0.0688384743491215
 0.7062612219056222 0.4079178740445142 0.1929985558145152
 0.8873262493836818 0.4113977585733263 0.3120331125249046
 0.8053492031966533 0.5781652434063367 0.0644115697579861
 0.9716343248595170 0.5776144495416262 0.1887964353663781
 0.6933696761213928 0.5817490080883142 0.3296605747714035
 0.9719246337418130 0.5786358057979329 0.0014340956401878
 0.6443979221243047 0.5780409045293347 0.1250327731749895
 0.8025447879933539 0.5785218595552738 0.2454281681277714
 0.2175823603324918 0.7449694590850457 0.0044992505207960
 0.3817813543077969 0.7514416463691173 0.1260398059319813
 0.0525194560716871 0.7466378759287464 0.2471751231360358
 0.0485931331824689 0.7471254355725743 0.0673831218121619
 0.2197859778547953 0.7376971682446418 0.1904937386153404
 0.3769821318038262 0.7549232591911083 0.3132643100646320
 0.3027762036427674 0.9183556277352819 0.0660593762847684
 0.4751907427036580 0.9068207472032015 0.1904708668865580
 0.1393341984624065 0.9109860189490891 0.3117186747089456
 0.4699601576452726 0.9094588147008492 0.0023651826721878
 0.1401679666475673 0.9087246284905039 0.1268119348809180
 0.3042767817974016 0.9122135167712035 0.2458329916391238
 0.7149752558372389 0.7455438658333670 0.0026848128036900
 0.8839507067482527 0.7424364585729837 0.1270141512488039
 0.5566864692959136 0.7344379663979813 0.2537549434458182
 0.5502497550432789 0.7434480310978071 0.0691298537038658
 0.7163333011283903 0.7494054402191739 0.1892919661297235
 0.8904873924002211 0.7453517798683648 0.3118260933400983
 0.8038615516463018 0.9095852141994260 0.0663804438367114
 0.9697904002797070 0.9116646925655014 0.1866463930389372
 0.6407299544752147 0.9137423099837307 0.3118842276942429
 0.9691488559313194 0.9132178766112020 0.0015991616238148
 0.6374569853364669 0.9155273744935655 0.1250248098555626
 0.8075917832556458 0.9120169510479722 0.2474760301834959
 0.4946000575679233 0.5628357556291463 0.3623313449892538
 0.3866767638570893 0.0789478655671741 0.0359166367597843
 0.0522907638658159 0.0779290065896597 0.1577852715319198
 0.2213720464384235 0.0770613338251835 0.2790943564959426
 0.1345623236451519 0.2428766578166721 0.0355134115112987
 0.3010119900824401 0.2451483988141467 0.1580749002537329
 0.4706839422578929 0.2446241236614536 0.2804967104304793
 0.8857685190238743 0.0782831443703522 0.0358157986110364
 0.5539911251494061 0.0796160605483167 0.1584154203055662
 0.7216473322453621 0.0782577137691569 0.2792093954789851
 0.6349033647686293 0.2451492465794054 0.0356634702876651

0.8003009578258943 0.2451161635058602 0.1575429200774941
 0.9685772402739175 0.2428462978744516 0.2786187233167355
 0.3849888090388984 0.4111529001159565 0.0362456972861452
 0.0518602270338638 0.4116900359497708 0.1571522400181756
 0.2122120375915856 0.4082511115169832 0.2790258857266834
 0.1345273669789620 0.5785008685515023 0.0362497245233098
 0.3055212134743797 0.5767166627817795 0.1579616909791475
 0.8848963288712804 0.4116153595526710 0.0357564152415647
 0.5503748616926214 0.4159324091702016 0.1564728421997656
 0.7204662213214833 0.4104033204457653 0.2809311939021902
 0.6357040053142384 0.5793997251110492 0.0354897458237315
 0.8019362473328350 0.5794981604575354 0.1575672650746144
 0.9672824528771489 0.5780901181784193 0.2787052499173573
 0.3861194451415445 0.7452798759786531 0.0369031737977809
 0.0532521861783001 0.7436072651179680 0.1572551007618647
 0.2181842693492215 0.7434085319199816 0.2785134682895053
 0.1355644498303969 0.9127828944572438 0.0356834983412260
 0.3027700060651649 0.9118736622099415 0.1579001197822331
 0.4712112963273772 0.9100921308385752 0.2786641522180041
 0.8867314333143564 0.7448881801260834 0.0353503018504538
 0.5528584523670901 0.7418746006771276 0.1589049031847001
 0.7243839931232932 0.7500247137680265 0.2791792238608294
 0.6341755448569807 0.9111582832167384 0.0362798267953478
 0.8022404615717635 0.9118442438804557 0.1564129678520859
 0.9714813253154458 0.9112695716523583 0.2782775093286679
 0.4547368212302745 0.5922332484724608 0.2952086478820434
 0.3851494995073098 0.4158436625508506 0.3596165881963271
 0.6288432473223303 0.5792843242675380 0.3528530713995146

(Rh SAC) Structure (7) (E=-968.99 eV)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017
 O Zr Rh H C
 73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2139038146864327 0.0799190497237991 0.0015597343310367
 0.3881109275687143 0.0745666884508257 0.1301200344774816
 0.0531055469497903 0.0736343587096792 0.2483046933840399
 0.0511788882398710 0.0727367830062595 0.0685532305559326
 0.2144792797833929 0.0809092063021893 0.1874517346363716
 0.3885592104467585 0.0727443229499032 0.3117004228745001
 0.3025537707431504 0.2398808672501717 0.0679509340436859

0.4714984068652351 0.2480084536118688 0.1915874282360643
 0.1331206129565202 0.2377591158313356 0.3133550647087942
 0.4674244693767015 0.2471026687616527 0.0025784171984753
 0.1350963673824477 0.2453372184978561 0.1249943809362614
 0.3022188874955197 0.2431626179629664 0.2474197746861442
 0.7169572919663316 0.0758415387253712 0.0043702497227075
 0.8831099087051715 0.0792308932491756 0.1255120605543853
 0.5542077365776638 0.0787529688360598 0.2481803886862489
 0.5478427651450181 0.0798754129381269 0.0671534016635369
 0.7200162989874983 0.0747812504908660 0.1901401389532387
 0.8868590165959006 0.0768056657928725 0.3134825099593285
 0.7995298858407063 0.2459544506730350 0.0670462880601230
 0.9689991906482517 0.2414142282499827 0.1886978952973550
 0.6360193555982696 0.2466016447264133 0.3109384522892349
 0.9674664308557983 0.2412076690086879 0.0036202810477884
 0.6353515275328107 0.2429765299315537 0.1274738029613462
 0.8045025013302644 0.2428660305427897 0.2485563670369338
 0.2159631834912503 0.4092798939074543 0.0046467991826025
 0.3842718866053278 0.4072735292734527 0.1276472651933035
 0.0522447191843380 0.4060386256959753 0.2488902467970329
 0.0464394286724063 0.4110148259374446 0.0676759492005180
 0.2147517168988761 0.4111134598916326 0.1887160952746310
 0.3630972607170159 0.3612040607675519 0.3294519971941673
 0.3013945271346413 0.5756895454365039 0.0685058275749482
 0.4642079538680388 0.5858663843883646 0.1839329880481081
 0.1329701720766458 0.5773073500427102 0.3114606347430591
 0.4668859820281058 0.5771237094840040 0.0037375348126827
 0.1337762736143083 0.5779711481767780 0.1252951413846260
 0.3080348671716293 0.5557232691552682 0.2542044322123746
 0.7143810009257202 0.4111340478394724 0.0029454729475892
 0.8814284596902131 0.4105505679000082 0.1279598817870028
 0.5426466651799292 0.4303312357559078 0.2542600777958725
 0.5498758474838398 0.4115754250266149 0.0696148296776830
 0.7133224677141725 0.4076334838962835 0.1922793207049230
 0.8871312419519412 0.4098728260973606 0.3118962912612074
 0.8009942988995202 0.5769559140944952 0.0667571214514827
 0.9701249292235001 0.5742903776164178 0.1897979395534704
 0.6850021192467731 0.5754085669015780 0.3296699136278411
 0.9673309684030523 0.5771190035503772 0.0023054990859185
 0.6389153045240706 0.5757416293847154 0.1279994778379346
 0.8024682343919384 0.5795302805759825 0.2467301332960462
 0.2179502789185050 0.7427300268777449 0.0039586396282628
 0.3814529312677089 0.7508955198788737 0.1247499540690590
 0.0517145913895122 0.7458802614638149 0.2465972922915232
 0.0490964069738446 0.7457323694958324 0.0665338276483280
 0.2221278194726096 0.7335796707694767 0.1920499116341698
 0.3806334151895572 0.7536715520035635 0.3035294183292169
 0.2993836378558202 0.9172048669127293 0.0657903334027590
 0.4744484811193642 0.9020978362593084 0.1924725192444163

0.1383476841135786 0.9067922258953908 0.3130224961445384
 0.4687689200226858 0.9086752553272546 0.0036428490137166
 0.1389272709724037 0.9042192262816878 0.1279877694520495
 0.2990153361655341 0.9170400174679398 0.2452168212672472
 0.7152624129340459 0.7440296246286618 0.0031134427807806
 0.8863579876763913 0.7401214052748004 0.1271007029752325
 0.5663267110285225 0.7268734504684999 0.2546800735201986
 0.5511289241213796 0.7416314817011346 0.0691955386519465
 0.7183644562438297 0.7494703126783545 0.1885779078720932
 0.8923275010973338 0.7428114096791416 0.3136943624477528
 0.8019562942715891 0.9073620789030061 0.0678782621181460
 0.9676803148205020 0.9116594635043340 0.1872486224667134
 0.6385956634009132 0.9130682730812142 0.3120831518877447
 0.9658073034898417 0.9115747091084399 0.0019742698759038
 0.6347784467647318 0.9147310308302539 0.1253611172829520
 0.8072539888554301 0.9096109552008896 0.2493385766436496
 0.4790874162120483 0.5662346759481928 0.3467774522050421
 0.3853157272301651 0.0780269234759035 0.0365418521673676
 0.0515983316635368 0.0764746545158405 0.1572771284339842
 0.2189881180422226 0.0751177158312064 0.2785004361275881
 0.1343490698633271 0.2425449805306507 0.0358216614631668
 0.3006159296251415 0.2438950576735281 0.1581814463834307
 0.4694105788101498 0.2424042869762832 0.2805883396349468
 0.8841421507180522 0.0762828965568644 0.0360598063461303
 0.5531625266828460 0.0781599575124378 0.1585762914937886
 0.7212025151619911 0.0763828328255095 0.2791060574012646
 0.6334213629758095 0.2455985208660397 0.0373116953694491
 0.8005778807154088 0.2436142475976458 0.1579616323322511
 0.9685391239136956 0.2406757011793301 0.2795006560863801
 0.3860505836110849 0.4101291071667810 0.0372689358839149
 0.0511292780723507 0.4093151950783581 0.1575084146273000
 0.2129386376274917 0.4022570555301272 0.2810609385691794
 0.1333933695525217 0.5766244949458026 0.0364572340712410
 0.3018975139966036 0.5746577442794137 0.1573557286606719
 0.8833399185737284 0.4105730874918437 0.0366502058756760
 0.5496032324222451 0.4148755790262048 0.1616648545103994
 0.7214074096041596 0.4095151543523685 0.2810419955947784
 0.6344397599748941 0.5765049715547912 0.0368180312055855
 0.8013128811215884 0.5775672043345487 0.1583782637570253
 0.9693790812464158 0.5758038540321301 0.2793030935506347
 0.3841762573989718 0.7446381631049563 0.0368400273470957
 0.0514585265358924 0.7419502992932691 0.1576091586157641
 0.2172634810921113 0.7418242031512962 0.2792709002727859
 0.1350059357108211 0.9107894191471277 0.0359678217434625
 0.3018293344434130 0.9098718918946220 0.1584067465639704
 0.4720798417858134 0.9115318016817995 0.2795934251371530
 0.8849569542452058 0.7432841916217352 0.0356604923396042
 0.5541909582438752 0.7431823808158007 0.1576856818998277
 0.7279680724121663 0.7458173863254219 0.2815183254872032

0.6344081092630031 0.9103658338547844 0.0363947042624247
 0.8027387466544109 0.9103190132056126 0.1570465372102442
 0.9714890953975994 0.9097595412687540 0.2793117258424108
 0.4583971198191690 0.5980184197990190 0.2750349910001436
 0.4032112056749284 0.4332790923486433 0.3456413344724809
 0.6098285918492825 0.5711939075888485 0.3447232738219315
 0.3407738551982798 0.5985929338679273 0.4880020422745532
 0.2663618202756797 0.6888238949350562 0.4406112029155396
 0.3781359622788636 0.7558093436972515 0.4744148188631935
 0.3979456948779864 0.6390303840192639 0.4236400632499023
 0.3460998248839434 0.6703399333848482 0.4566282673346607

(Rh SAC) Structure (8) (E=-968.64 eV)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
 73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2155889147154909 0.0801772085101082 0.0017285193239580
 0.3886263292849668 0.0742454887361007 0.1293611367734848
 0.0539632761895726 0.0729478207508979 0.2477365473560918
 0.0515389000405642 0.0717696469453984 0.0678111068274000
 0.2158882352333898 0.0800976215391103 0.1872810630145205
 0.3891721408008896 0.0717398321614687 0.3115918416854384
 0.3024818241569419 0.2414263815502072 0.0685841441993537
 0.4703836800097017 0.2466352382098375 0.1919886900111670
 0.1321037272400074 0.2357774029885130 0.3138085013791848
 0.4666665812483363 0.2464147880901552 0.0027468048806919
 0.1339952209687699 0.2433091082374281 0.1248822376744307
 0.3014527271208575 0.2427898403684525 0.2479185781330834
 0.7172545546139014 0.0755001589699656 0.0039315299012727
 0.8844513820712651 0.0790054140525110 0.1253973631796153
 0.5552484640998420 0.0776072086435879 0.2480194467700269
 0.5491728877633567 0.0801919637757787 0.0671562137353652
 0.7208419900595352 0.0747654962558112 0.1898141420426923
 0.8880051391326641 0.0758136553302757 0.3133033591607807
 0.7984410579993869 0.2448150976570515 0.0674037465754722
 0.9686385561522911 0.2412689191061060 0.1890243440883628
 0.6353075312048410 0.2467954466676794 0.3111645212713217
 0.9667653298431065 0.2414075034990393 0.0039269827942317
 0.6344864259753783 0.2442308370503153 0.1281602673996829

0.8041505610119710 0.2424989359588020 0.2489879420263425
 0.2161931675834140 0.4087156788907442 0.0041992748377633
 0.3866798887149926 0.4088773635024863 0.1283720723879387
 0.0532088035956341 0.4060683071743550 0.2488892053138837
 0.0474392020798135 0.4107085313581320 0.0675504210849672
 0.2148232615190640 0.4083417128805202 0.1876032566886714
 0.3637835330608934 0.3607349153050919 0.3297633529979578
 0.3003478826371380 0.5744789652378307 0.0688406230979158
 0.4624890328038971 0.5889533253570823 0.1868920227913487
 0.1306298017253550 0.5775843910476377 0.3133116174665173
 0.4663805411399092 0.5773366462183405 0.0039145734335134
 0.1330440494120036 0.5775480458228565 0.1257609599369725
 0.3013357359338480 0.5544624832445599 0.2543748036298807
 0.7154143989149422 0.4109924037945925 0.0029051275455280
 0.8819137775789471 0.4097673094295669 0.1274352241215964
 0.5434110647616490 0.4295928056791407 0.2538197357201583
 0.5504491463893044 0.4111920679701541 0.0690686028244039
 0.7149608985853618 0.4077538258123624 0.1923524864818060
 0.8874792835863012 0.4093961122377243 0.3119279201917238
 0.7992652223238343 0.5769982570820663 0.0674803153203312
 0.9687842049984469 0.5733543288401436 0.1899263836541188
 0.6838560778715019 0.5753857221633659 0.3302328855608752
 0.9659996475191859 0.5763630334376408 0.0027185365904887
 0.6363011726762259 0.5747514287068599 0.1289028832044646
 0.8016355507327082 0.5799561554009358 0.2474462333917757
 0.2188908367191515 0.7419637366677956 0.0037288791792102
 0.3827113315202575 0.7492185707536336 0.1245264581353114
 0.0527633721935527 0.7444046739308369 0.2461306650616541
 0.0502019957161631 0.7451256508133253 0.0660194582448882
 0.2225866044764281 0.7343075111299756 0.1913095599406079
 0.3809714005351544 0.7529049027945572 0.3044408062276353
 0.2988695315750393 0.9162000077767980 0.0660499138691283
 0.4732748239202901 0.9027212943285507 0.1920449249948664
 0.1381445485155059 0.9058290381600079 0.3129589314659368
 0.4684713058433269 0.9089557194289438 0.0040807392951094
 0.1381567055430381 0.9042581561829562 0.1279791288034785
 0.2991500424783063 0.9152117204273166 0.2452371950578161
 0.7159622543686425 0.7440392598496698 0.0028678401756331
 0.8877135420738068 0.7398624736833012 0.1264627623278561
 0.5702934996572743 0.7331938447437643 0.2547554179011495
 0.5524222320944828 0.7416807337243942 0.0691595416120097
 0.7204723803450130 0.7483091697720067 0.1874434703485310
 0.8941594192507719 0.7431560831153248 0.3139363054821450
 0.8013611078922472 0.9074913336472400 0.0681130270045778
 0.9673048338398224 0.9107633173705220 0.1875450493562111
 0.6395439208753907 0.9154482300389306 0.3139436126145747
 0.9649359810708703 0.9106207191737190 0.0019014479376344
 0.6344158641738175 0.9146774851894465 0.1257931311082319
 0.8065192044988858 0.9091654630974670 0.2494141537774824

0.4766474013721361 0.5629380737155302 0.3515181040940440
 0.3852633100097094 0.0780104579202018 0.0367075407026533
 0.0519437845947067 0.0757701772292129 0.1570483273814607
 0.2191193777019361 0.0735745975608076 0.2783245120912289
 0.1345124109624964 0.2423305316352678 0.0358558450145500
 0.3009263272311773 0.2434599809366866 0.1582762516052511
 0.4689704309624510 0.2410584669142406 0.2808875355209257
 0.8839194422523750 0.0759104307464075 0.0359679526410819
 0.5532858770799951 0.0782350481717894 0.1584557228038556
 0.7212858922267595 0.0758985971412161 0.2793590595612742
 0.6335264417548840 0.2456537251383800 0.0373899505641116
 0.8009444645428382 0.2432001147939654 0.1581775280497766
 0.9690941498106004 0.2398412217298538 0.2795218302847124
 0.3861715085327809 0.4101690822346258 0.0374714206356764
 0.0508886937487529 0.4085037056635914 0.1574206821166832
 0.2125563817840503 0.4011723917316282 0.2813463868293217
 0.1338691647428822 0.5758727598202443 0.0365497229514161
 0.3007430674806202 0.5737039083399065 0.1580703859329956
 0.8828961434823156 0.4102535881540801 0.0367666963845841
 0.5499457369094405 0.4141043406835281 0.1623725726643047
 0.7217436258802359 0.4094500715533744 0.2811032300355775
 0.6343265810650566 0.5764984916651406 0.0371341226155831
 0.8013788618849592 0.5773073333242559 0.1585670478675668
 0.9697721994738506 0.5755845184192747 0.2798056663962705
 0.3842080434249770 0.7440980437444611 0.0369877412152136
 0.0510881303242006 0.7414875741655872 0.1573669502968331
 0.2173501887577406 0.7395132190586107 0.2785645934334818
 0.1352432056484670 0.9099748683285307 0.0360027595883713
 0.3022876395913867 0.9089518898731241 0.1582107647099278
 0.4736460990323084 0.9101194819393986 0.2790720427349218
 0.8846537046435988 0.7430567132788789 0.0355170996535387
 0.5550886113272478 0.7440776474776928 0.1581435251385324
 0.7283300408683958 0.7463221856222184 0.2817283016262599
 0.6346448418348262 0.9103926577556610 0.0364290140729483
 0.8032792041892458 0.9100921249712738 0.1570083134779895
 0.9721661682934462 0.9089618675533627 0.2792801151464145
 0.4582925865276449 0.5983203274568075 0.2719302528180080
 0.4013642195804794 0.4338290320421940 0.3468395009214811
 0.6107180669766177 0.5742136752041855 0.3469447243312146
 0.3486300338813039 0.5903907674197293 0.4842936453762315
 0.2652881948763488 0.6870081607999200 0.4372664526405542
 0.3855083193010380 0.7569142655644073 0.4708513940243561
 0.4407113260127504 0.6296581317944773 0.3712794159569079
 0.3348230801623117 0.6772122512769627 0.4629853426916419

(Rh SAC) Structure (9) (E=-970.63 eV)

1.00000000000000
12.604999542199999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.0000000000000000 10.774800300600008 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.727600097700017

O Zr Rh H C
73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2099850380466939 0.0792405247291664 0.0033054525016763
0.3792590506259039 0.0760573189278247 0.1281108577696655
0.0468442369192860 0.0762746692906918 0.2486152118479878
0.0442377924992821 0.0757658476072963 0.0680091714490988
0.2115344342521132 0.0800954259225678 0.1900315826160955
0.3802639381419152 0.0758187913780529 0.3129239991330542
0.2924409452385852 0.2435636221656854 0.0693755262778021
0.4591941961313999 0.2440139947207320 0.1911660279260581
0.1251838174788683 0.2402309224790436 0.3147014361650434
0.4587085626650276 0.2462928397540994 0.0047059323667110
0.1257267718430894 0.2439377093554302 0.1272538969516243
0.2948780059958251 0.2475504314504142 0.2500714645217155
0.7099512023593085 0.0772548284013944 0.0043404114216897
0.8789352323888142 0.0793421706931678 0.1267301334627698
0.5481546591489077 0.0810493038281435 0.2497623675582286
0.5432290991726565 0.0796892989432617 0.0684388838608177
0.7127443650964554 0.0763684891917174 0.1904689316474017
0.8811524417575938 0.0784858784625713 0.3145737869051232
0.7911483640853753 0.2451833897514623 0.0689333890649748
0.9595326958201771 0.2438640835654385 0.1907593911707178
0.6310039187290244 0.2421337600121291 0.3171896762186570
0.9583171445243920 0.2437238705436852 0.0044976935587531
0.6269480281522127 0.2447494072266173 0.1292327172106924
0.7943532484462547 0.2439786326171173 0.2502437536112181
0.2103216454892985 0.4114644726990552 0.0046999824422440
0.3786402023668147 0.4102307318106622 0.1283729500036093
0.0461039513907444 0.4092948995194679 0.2492501449966191
0.0427478379804970 0.4110036674694306 0.0679926325294183
0.2091031537839990 0.4102261953190597 0.1889989789752803
0.3602444902902741 0.3740267660993088 0.3284182734063116
0.2918349596341195 0.5779701911553113 0.0702190200522145
0.4580791456546380 0.5802817226489364 0.1874161152601228
0.1199897040381426 0.5788753058478084 0.3162080835133160
0.4582834359528297 0.5779125274279162 0.0053736868718546
0.1246536190674577 0.5780579602448231 0.1274668072913230
0.2840696527443448 0.5683510702961442 0.2539114601014530
0.7090295668458967 0.4115262479014810 0.0040104922277176
0.8781263150097409 0.4112566192253334 0.1273838720151433

0.5488322894119587 0.4074724998485920 0.2522188149949892
 0.5441969097441643 0.4118020359363778 0.0698219771794094
 0.7129678360442887 0.4105171014898462 0.1906259452843496
 0.8817014114042638 0.4097472444077922 0.3133626223323240
 0.7916302574224183 0.5778034218978975 0.0688824032244381
 0.9595068883111505 0.5768557432856570 0.1916541238732218
 0.6683405323974632 0.5773210979864907 0.3300350744396088
 0.9586138536374684 0.5781503967462804 0.0043062937839467
 0.6282094638437282 0.5779021622408014 0.1297819131482361
 0.7909517309269407 0.5793750018538504 0.2499899912180641
 0.2110704497512220 0.7433800248699338 0.0040299629623300
 0.3777826093740630 0.7485016509135128 0.1274518410467711
 0.0451908449624459 0.7463760474651938 0.2484399942125036
 0.0441287045674015 0.7462234673899993 0.0676603814698778
 0.2114214525796446 0.7413098452932305 0.1905804946060255
 0.3711980780051291 0.7604971209386786 0.3191255490429707
 0.2911423232615187 0.9129950160137432 0.0682301763190246
 0.4623859881625940 0.9111367661114341 0.1923199540053712
 0.1276217140243324 0.9112423759292341 0.3147422166027360
 0.4597190509567557 0.9106694765334377 0.0050900169739245
 0.1282372059895846 0.9102458052900048 0.1287680418899071
 0.2925940807610571 0.9115043686630341 0.2487855174395872
 0.7094363811114489 0.7452982529246663 0.0042358038523325
 0.8800959782772214 0.7430870673388276 0.1269462174854487
 0.5594804109658439 0.7477018166660748 0.2526893869590546
 0.5442918849024607 0.7436507989954556 0.0695050833410681
 0.7146108858196495 0.7482736155086093 0.1893110578385985
 0.8835923978616030 0.7455000022682255 0.3146079243557732
 0.7926553328254523 0.9106894392108227 0.0693551192548367
 0.9590265957796015 0.9117574270491361 0.1898621938116662
 0.6309495456554172 0.9173990171414470 0.3165275516293783
 0.9574337505568651 0.9113949116577356 0.0036330470839770
 0.6264893287465599 0.9129629161721737 0.1275339658038957
 0.7970309842092810 0.9119738365918293 0.2509672842606843
 0.4553901030729888 0.5783188046854362 0.3856278826910601
 0.3768085502858095 0.0782790298630759 0.0378646381429212
 0.0443012752292741 0.0777384514771691 0.1585022756237399
 0.2123504747794409 0.0774529105371867 0.2799480563228546
 0.1273498777713063 0.2441879492643157 0.0373516862930079
 0.2940985554964154 0.2451885541703314 0.1592425561113439
 0.4650152518274952 0.2452599432081854 0.2809172474208960
 0.8767393022960427 0.0776492345828414 0.0369718605025041
 0.5448697812348425 0.0785379189466487 0.1588589651221028
 0.7124184448772399 0.0781680129237929 0.2821814268692608
 0.6265783902615774 0.2461709357702792 0.0382594789830241
 0.7941315936828682 0.2441118536230107 0.1589618107522402
 0.9610430150817162 0.2429748186623264 0.2807583784948111
 0.3781036611796648 0.4112849658872756 0.0386231223766077
 0.0431974991930449 0.4106441476934816 0.1585037224592024

0.2042890540569241 0.4057287360748305 0.2816714079017860
 0.1269173813235485 0.5777331680245439 0.0373278118197806
 0.2921852335432720 0.5767033187356387 0.1588726944474239
 0.8762191502904716 0.4113364446095688 0.0375881124252830
 0.5446484680306820 0.4115965962907809 0.1628993545572577
 0.7116342905280628 0.4070145392057505 0.2810551118159320
 0.6270030591363697 0.5773074810195595 0.0387612993700535
 0.7942892735343962 0.5784436777815652 0.1595883520372700
 0.9604643682737221 0.5766874862886018 0.2817202540090583
 0.3769222314572971 0.7450298328767700 0.0382076807851595
 0.0434364412293376 0.7442221551372969 0.1585124427230611
 0.2048028953097740 0.7451886928187981 0.2805552713888692
 0.1278206280207963 0.9113273580735387 0.0373027046303757
 0.2946293522298767 0.9105539639608390 0.1596874000763494
 0.4642845033897047 0.9167450988551205 0.2810537670250567
 0.8768455078768754 0.7446760845924599 0.0371034102830680
 0.5463139444226421 0.7461480194174953 0.1593544641147791
 0.7191833451082238 0.7489604895069284 0.2819466159093780
 0.6273664942914633 0.9114424068089105 0.0374836613008316
 0.7951507923428480 0.9120152219062806 0.1584848374855215
 0.9631075437077790 0.9127539055237307 0.2805752543748582
 0.4289459250504263 0.6430710118230425 0.2628747132786564
 0.3924411993634643 0.4413597466960456 0.3502287001597946
 0.6053108362916563 0.5771854820076731 0.3535471042965984
 0.4628852083593592 0.4975743109587916 0.4608408247033224
 0.3427941318784448 0.5812779173775683 0.4483881628612742
 0.4637566974909867 0.6636925145544549 0.4620120498016449
 0.4225856643476353 0.6521274640711132 0.3675769781911203
 0.4293887618252655 0.5813577633944492 0.4422943834302977

(Rh SAC) Structure (10) (E=-939.88 eV)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H
 72 35 1 2

Selective dynamics

Direct

0.2098981823123711 0.0793679934404920 0.0032934152436552
 0.3792529863879367 0.0759278505826734 0.1282642058344534
 0.0466344745945700 0.0762136543761212 0.2483463588055242

0.0441781621363890 0.0757109552004226 0.0679479711335858
 0.2109544113680017 0.0816118695136274 0.1897738800140683
 0.3802444759265778 0.0757461642271670 0.3127777323834607
 0.2928765067642622 0.2434946209773904 0.0693020227824336
 0.4595546067005880 0.2440195844783359 0.1910665345106263
 0.1243579511207855 0.2404881478029923 0.3142872215828782
 0.4590267104440316 0.2465389476942723 0.0045776239993880
 0.1257931269906251 0.2446221934348793 0.1268232961464763
 0.2955172640960180 0.2487194644498328 0.2501091548093626
 0.7097405671450044 0.0772851093410521 0.0043104448485836
 0.8786022467376844 0.0795469951552038 0.1263542239464404
 0.5482472007413339 0.0812923772039436 0.2497693802796516
 0.5429617704283124 0.0796888134216827 0.0683764177857332
 0.7126319788242601 0.0762706840635620 0.1902910434165226
 0.8810585211270597 0.0787705355693213 0.3143614805519605
 0.7912431416225068 0.2455492191011233 0.0685668193200756
 0.9595593421008501 0.2436318972591558 0.1903205721277042
 0.6315844451445558 0.2422175591898736 0.3172244999456511
 0.9585275896686398 0.2438370821734369 0.0043134451682648
 0.6270391995234642 0.2445785919324160 0.1290046083364768
 0.7943209822826601 0.2439809960857147 0.2498354925875531
 0.2102153446507865 0.4115377675000102 0.0048281817804535
 0.3783705382558464 0.4104544901937858 0.1285291035771824
 0.0450377830544916 0.4093143679949552 0.2488712175842537
 0.0421798959323123 0.4113988376518221 0.0678652321602327
 0.2084099458924635 0.4104540183741494 0.1890118597578254
 0.3572243276935804 0.3702722034492612 0.3296431941573175
 0.2920754580632485 0.5780196872890470 0.0702613686115973
 0.4583144748690955 0.5799474321291772 0.1879178924783398
 0.1191761262686047 0.5782227332720251 0.3158719376928541
 0.4583865701128685 0.5777263110891809 0.0052767291846396
 0.1247702345905077 0.5783020504290556 0.1273638566542704
 0.2845087037575715 0.5674933439384651 0.2544151869215489
 0.7084018246140419 0.4117023071817816 0.0038703144474418
 0.8775699674914277 0.4115367891618112 0.1273176579955340
 0.5483615146601084 0.4077894202161897 0.2528315815915942
 0.5439102957862615 0.4118503341856840 0.0700395265016503
 0.7124265872461980 0.4102498974163064 0.1905970013988515
 0.8811889946916551 0.4096299878383019 0.3130677313682996
 0.7915274183393231 0.5778229984821057 0.0686582096063534
 0.9592792567270531 0.5772152750178206 0.1915246707680349
 0.6727143559400944 0.5783547701748151 0.3306962084793447
 0.9585662934157052 0.5782880197880765 0.0040837506878540
 0.6282000037209819 0.5779659831356198 0.1298284157652536
 0.7901526953271235 0.5794864003996006 0.2497014768965670
 0.2109803542597459 0.7433121982565105 0.0040549052070496
 0.3776722548008184 0.7485346193241683 0.1276302679686680
 0.0452784748924797 0.7467670565365682 0.2482961926264563
 0.0439126976080552 0.7463954809780993 0.0675639809412205

0.2118482284889758 0.7408919387915026 0.1908454878552761
 0.3693180741938186 0.7632242490650857 0.3173842577473228
 0.2915937388344457 0.9130324038709727 0.0679610977662809
 0.4627851692120570 0.9106038461283724 0.1925005010977765
 0.1278520997014577 0.9117916076173076 0.3146005206091429
 0.4600693780771532 0.9104541929519273 0.0049472225765823
 0.1288894501357077 0.9100609823991098 0.1287066193267905
 0.2916514161553330 0.9135587395244832 0.2479452521522942
 0.7089476049609128 0.7451951557798894 0.0041433006642973
 0.8799399676053150 0.7428299539029334 0.1267944912940328
 0.5596898110720475 0.7469551642805701 0.2531755093671599
 0.5439356010808740 0.7433785950772070 0.0696349061503400
 0.7144604953740001 0.7489030486809870 0.1891886496394904
 0.8836850446860300 0.7460148958303396 0.3142901198082739
 0.7927241867878763 0.9105655751417573 0.0690204435750658
 0.9593115417142709 0.9119430755755451 0.1893301859704085
 0.6320279585016454 0.9175081886749294 0.3162467832251617
 0.9575503112814469 0.9115608967149555 0.0034140064694797
 0.6263937975717487 0.9128639496443831 0.1272966199444706
 0.7978344529757795 0.9126049287528734 0.2504987913602450
 0.3769704878049139 0.0782434591725037 0.0378025559486389
 0.0443496116720830 0.0780148578195379 0.1582139158741914
 0.2122640103001317 0.0780442402800863 0.2797865338471378
 0.1273455071419995 0.2443514231239481 0.0371911538637925
 0.2940087173769476 0.2454980172334859 0.1592086802554523
 0.4654390553800508 0.2438071679277778 0.2805244264284155
 0.8766923018227739 0.0777451116283063 0.0366784958617443
 0.5451080153808072 0.0782990865075014 0.1587743486712128
 0.7126842431971883 0.0780715790070849 0.2820636216248471
 0.6262964923185035 0.2463056115340397 0.0381157179408972
 0.7939293924766032 0.2440456534744217 0.1585100826472048
 0.9607548045352421 0.2427100800620558 0.2804326430127860
 0.3781973307046309 0.4113968158966980 0.0386724551779394
 0.0428562593635851 0.4108470997577303 0.1581484614263362
 0.2022677497499196 0.4063617401128478 0.2812351357944594
 0.1269797046455446 0.5779584713118230 0.0373798361335696
 0.2926040326478503 0.5768890093154031 0.1592095352098792
 0.8760358299878974 0.4116062841246708 0.0373743330350610
 0.5444260712135017 0.411928331273314 0.1630156570425371
 0.7122573277407160 0.4061858647958594 0.2806365114492685
 0.6267233493613805 0.5772897185367277 0.0386408498084685
 0.7940611664614080 0.5786267038704928 0.1594431674733778
 0.9600778285496362 0.5772475556853895 0.2815268907669860
 0.3770938008294112 0.7448873451541875 0.0382512975945407
 0.0435530314104040 0.7442358538228780 0.1585252233474320
 0.2061296018113133 0.7456201829896921 0.2807447173288333
 0.1279705103175288 0.9113529144203547 0.0371689538261893
 0.2945842598274415 0.9108884514186203 0.1595592497392860
 0.4634133816328073 0.9154778891878365 0.2812192215590623

0.8768580368868049 0.7445955161965807 0.0369304452837968
 0.5460158209879923 0.7458032365788043 0.1596335713367922
 0.7198137289536619 0.7507362675016933 0.2813792634820894
 0.6271082682748736 0.9111711453220733 0.0373615866615963
 0.7952302710701918 0.9122290926783903 0.1579918183843200
 0.9638577067617770 0.9127741829322452 0.2802803683293666
 0.4295084701760480 0.6416333564012341 0.2644664085327409
 0.3833757951429331 0.4301448597673304 0.3559063806321164
 0.6187414198216830 0.5806783928381587 0.3587762836965673

(Rh SAC) Structure (11) (E=-970.39 eV)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017
 O Zr Rh H C
 73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2153830588994565 0.0729759065171631 0.0016990273690562
 0.3841315743983016 0.0744547251349205 0.1261986595695450
 0.0512049363108553 0.0745426023143554 0.2462961766267909
 0.0494917713409198 0.0755083773488992 0.0666055230124548
 0.2183046912234711 0.0718467138253887 0.1894495959243797
 0.3835064428849422 0.0741084293936816 0.3105859529838978
 0.2991856728464666 0.2391118329788864 0.0657992714146131
 0.4698171618368703 0.2394655085768279 0.1891609263678977
 0.1349680694016741 0.2378979670941121 0.3112428466893811
 0.4673588561281153 0.2414152312676620 0.0028276941056090
 0.1365059450672548 0.2408247995960471 0.1266063068273723
 0.3029199872710177 0.2439518138582026 0.2461162025778494
 0.7155296951293006 0.0742212006751437 0.0027144471713713
 0.8842616054690340 0.0730300385140122 0.1257089248925466
 0.5526851982619997 0.0723837710552140 0.2489846682124456
 0.5486892960935946 0.0730540244398801 0.0669914791340480
 0.7169327016667706 0.0742583714590000 0.1889438657982107
 0.8872263197854544 0.0737100296967168 0.3128603642253301
 0.8007322112739749 0.2410069980204539 0.0668135706805886
 0.9672451005298471 0.2410520122724095 0.1873724997597087
 0.6402371129192604 0.2344677797669806 0.3145433331428368
 0.9655080931081246 0.2401104019051890 0.0013223205412449
 0.6350230089056155 0.2395305799992432 0.1253512928073625
 0.8043563341643166 0.2391024127295331 0.2477710049713918
 0.2164780995838713 0.4087595380787493 0.0027473694057675

0.3834896889402969 0.4036224111403892 0.1262601985373880
 0.0520327937799926 0.4059282985568172 0.2471068684801050
 0.0491582043687726 0.4046565256384367 0.0664313591694893
 0.2174398893436363 0.4114315772535420 0.1891195978653655
 0.3662979153868101 0.3703128350699372 0.3240206694350799
 0.3005579878285891 0.5742145319478678 0.0682408867409343
 0.4659309010060579 0.5717467487368467 0.1849284736710298
 0.1279656546315982 0.5731768855334308 0.3140381948600722
 0.4659054200518113 0.5737307289944434 0.0028495525586824
 0.1327348548582319 0.5731362501682787 0.1247231622371338
 0.2954043609601785 0.5808923023574775 0.2527737045316836
 0.7148623229192064 0.4064036073453804 0.0024544262376432
 0.8847848140154291 0.4091092265742995 0.1256869204389969
 0.5602055641708463 0.3995762080992987 0.2510540101703717
 0.5497340718344047 0.4083897846241051 0.0681747860130394
 0.7190227018523768 0.4046594438110493 0.1882244899192705
 0.8891294322333284 0.4054107252330131 0.3119838526778655
 0.7994425796333622 0.5737641696149770 0.0660225508161374
 0.9685388545862502 0.5748363046327790 0.1890383799318414
 0.6780514964267106 0.5734696924864329 0.3263391236271322
 0.9669253085017910 0.5736795666427013 0.0023808635194327
 0.6365967773535406 0.5741756108246325 0.1272095131115817
 0.8007773609079980 0.5728486495546189 0.2467065707285831
 0.2156057016378388 0.7395061040051012 0.0029848729677698
 0.3841184862902324 0.7426786508455396 0.1268872142152312
 0.0519756096414423 0.7423479205945643 0.2479566033503125
 0.0479998224211549 0.7417531378705663 0.0668350383632828
 0.2142376586162535 0.7394424252110303 0.1873332134062324
 0.3579366326151017 0.7947355041416536 0.3344266917834392
 0.3001663712823411 0.9076215916153039 0.0662683590319016
 0.4698298287271087 0.9084465174773603 0.1886691467183842
 0.1340365995943787 0.9125753796900846 0.3117309977940512
 0.4671213132990226 0.9057352364858844 0.0024767303157576
 0.1350176980948382 0.9084676844431199 0.1252203417720736
 0.3051434955031158 0.8985527851778370 0.2463284874569723
 0.7146800763777099 0.7408208900617655 0.0024264673813106
 0.8823883206636165 0.7397447149290780 0.1260327388135820
 0.5512695258725925 0.7430864066354785 0.2523599963289801
 0.5493117817466580 0.7393556920123034 0.0682328219596195
 0.7159813769305242 0.7425176613675628 0.1899205568323625
 0.8872961321698574 0.7418715979099225 0.3116529226975083
 0.8001288560261468 0.9069344521913775 0.0664524776999804
 0.9677662108345301 0.9066326713744485 0.1877604639524360
 0.6395311159090045 0.9094063066014577 0.3139879396283944
 0.9662773947514414 0.9080166921636535 0.0019375256495276
 0.6354129614051466 0.9069652495826532 0.1256738861714186
 0.8038561564673946 0.9082040276585375 0.2476569058080861
 0.4761132097029254 0.5622691366733373 0.3506676106569539
 0.3837526200018381 0.0735478201995206 0.0357720452858347

0.0510456047901268 0.0738910158691670 0.1567433249358197
 0.2190268469686190 0.0750343207380621 0.2780815760411081
 0.1341473419963269 0.2403520516120758 0.0353438613988243
 0.3014825720720760 0.2409703679787909 0.1573913148492803
 0.4705989226894991 0.2368438459221561 0.2786689142562362
 0.8839235876181349 0.0741269257922018 0.0350841131755812
 0.5520539201976657 0.0734125832346493 0.1565230045629858
 0.7200205907296968 0.0737533838806163 0.2803154353966322
 0.6336130518927529 0.2410190146249292 0.0356055538580925
 0.8014024335199915 0.2401090008241296 0.1565896877516716
 0.9693206955338569 0.2393709775966573 0.2782078212257353
 0.3842112569112505 0.4072762433962583 0.0365979576829413
 0.0506852963274521 0.4077870633872581 0.1566615753797103
 0.2130023992635296 0.4079703750921398 0.2788729940311161
 0.1337334528598917 0.5737417918497818 0.0355281954639295
 0.2999858816476910 0.5746852550699018 0.1580221471872037
 0.8839081453537633 0.4070574690768583 0.0353241655182072
 0.5525504587758047 0.4060501818041515 0.1586528660455142
 0.7230897195844287 0.4018926892249596 0.2794683263484569
 0.6335261719974677 0.5736782814727029 0.0365595563043186
 0.8007175924207007 0.5736088066942613 0.1576237685613942
 0.9664719837043532 0.5736197239731371 0.2793647020049894
 0.3845510066974697 0.7401270619638024 0.0365316782429874
 0.0502428940016899 0.7405792130619543 0.1563192612105131
 0.2104644791761006 0.7425481717131890 0.2789042416111962
 0.1337767758277899 0.9076167712122137 0.0352407821003977
 0.3010594308131764 0.9063613714676867 0.1570887578517644
 0.4698360170986310 0.9105319431775537 0.2788089092417808
 0.8830363815279733 0.7405452627599661 0.0356330642161948
 0.5511384918275389 0.7403340102445711 0.1591033177288917
 0.7213676091882556 0.7442726270846434 0.2797578941098828
 0.6334857465272585 0.9063386864286783 0.0357305264821712
 0.8005957049514226 0.9075307222085294 0.1569456348898966
 0.9682239467144121 0.9094366498493504 0.2783445983215423
 0.4657992588655259 0.5695956800184416 0.2682998988559219
 0.4023136951712077 0.4398520728505380 0.3450264912957595
 0.6062385763589133 0.5722392039024202 0.3449374585395573
 0.3162552611177351 0.7382968082415415 0.4128065886728831
 0.2868778953892481 0.8967019322029854 0.3973801730063992
 0.4208493040473347 0.8496143394438139 0.4093309939601341
 0.4401773163509598 0.6374712055764256 0.3628962736631405
 0.3447955998183683 0.8213953021982631 0.3910091554872400

(Rh SAC) Structure (12) (E=-974.68 eV)

1.000000000000000

12.604999542199999	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	10.774800300600008	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	24.727600097700017

O Zr Rh H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2122446046831025	0.0760789999384612	-0.0007864405145740
0.3827390781409876	0.0760813559567209	0.1254077096110432
0.0489427428917866	0.0754809554041298	0.2447749402702026
0.0480041658064154	0.0762788153448983	0.0654528151385267
0.2157460841967683	0.0755887931530426	0.1879261828730837
0.3820660093218434	0.0746992682589718	0.3082987063674021
0.2990712226148045	0.2398628976341769	0.0635438721422078
0.4711155447643885	0.2432144470327384	0.1872058419349894
0.1342332147499910	0.2389479605143881	0.3088814398937431
0.4668447290554567	0.2448001265522434	0.0003697162273766
0.1362406019587517	0.2432457797812087	0.1241650190426114
0.3035926252631997	0.2479660057215674	0.2440040897744441
0.7139267749698036	0.0759986494588529	0.0014734676237198
0.8816664641500256	0.0759100718511043	0.1237537439257436
0.5513809822301169	0.0764640503915777	0.2469240068642294
0.5455839314941908	0.0761333366142013	0.0648937467713182
0.7154727778615555	0.0757043156186680	0.1872018547717894
0.8851038589953762	0.0759901348333567	0.3109964691082464
0.8007119350186962	0.2439411353475321	0.0642315642252159
0.9672048307726703	0.2428277311059319	0.1850448201137338
0.6389708464484352	0.2396825157197896	0.3106592408556382
0.9656720440166328	0.2412595113386645	-0.0007972738240544
0.6349992792775531	0.2415528992608927	0.1227956870882810
0.8040160797050045	0.2413996187028818	0.2451428712610861
0.2141314380101001	0.4106002075142146	0.0015569910846187
0.3801757227370833	0.4040419459409093	0.1247031508478310
0.0500881590725492	0.4074179156976234	0.2457871971314148
0.0457721977484847	0.4064426095066817	0.0650791004684847
0.2145395720994178	0.4144566091415281	0.1874752273097563
0.3623937135378748	0.3688272503090610	0.3244635289061990
0.3013435874891916	0.5761511414116809	0.0662506948915234
0.4658774384251880	0.5766097252545215	0.1798250972127018
0.1284369199303445	0.5759148233203872	0.3105712321854276
0.4653057009463399	0.5759143908433504	0.0002915434049814
0.1321455365981053	0.5754962658646451	0.1221050474048869
0.3017591101823902	0.5778707887625483	0.2514423469328033
0.7122048287730262	0.4086515499478618	0.0006056457879808
0.8809168966229994	0.4114076860420520	0.1247232528543296
0.5492270993020864	0.4128802470593830	0.2516976407994882
0.5470044785938860	0.4116081419773139	0.0669745682476986
0.7132391841277480	0.4055547135304242	0.1878314362856091
0.8859488256328605	0.4082049511716783	0.3094817906812748

0.8000575101061573 0.5757459754670713 0.0629687401134528
 0.9685209428097404 0.5761475079823422 0.1870524880496074
 0.6795534217893258 0.5754748943307255 0.3240750474754629
 0.9675416469083240 0.5758590022968592 -0.0000136403416532
 0.6390074161535243 0.5761469409414289 0.1245902254063666
 0.7992579187383864 0.5761667289237118 0.2437638179967073
 0.2139438132923126 0.7413730690253960 0.0015073698470829
 0.3801990099580732 0.7483360473833213 0.1246001343084248
 0.0496114837732019 0.7449080204568219 0.2458717144205256
 0.0456750131334309 0.7450931760708951 0.0651091702982179
 0.2132038793758498 0.7378423281259426 0.1866964079342928
 0.3630640070751150 0.7828167000819691 0.3270008845129374
 0.2991174722515473 0.9121780371657370 0.0633057694495059
 0.4719485054566609 0.9092276028361703 0.1869572712903432
 0.1354001576747441 0.9127486734958811 0.3092274415671948
 0.4670256191088685 0.9073395642950239 0.0003093372095196
 0.1359428026612968 0.9091065735499797 0.1237541011708756
 0.3045866690673966 0.9014924123494961 0.2433521734328139
 0.7124283766221264 0.7431407308616810 0.0006122926958482
 0.8802977156786543 0.7404487547586130 0.1245988041956554
 0.5488406999512681 0.7402743800891870 0.2521632511594241
 0.5469631902755161 0.7403235795234159 0.0668480012533467
 0.7126437890424483 0.7466886902778089 0.1881581831253896
 0.8857343307019834 0.7435455430486768 0.3097637359675730
 0.8009172204977325 0.9080415796891778 0.0641182893490301
 0.9669829458094940 0.9088392871442177 0.1849243893618049
 0.6390525248357681 0.9126037174593707 0.3108477801938225
 0.9659635674577631 0.9106761630965688 -0.0007510996515934
 0.6351730781470635 0.9105740871992748 0.1224977591881188
 0.8041131390067003 0.9102059834515112 0.2453451539995488
 0.4988604877561655 0.5209621442276766 0.3688444966239389
 0.4801055792022475 0.5968025214129025 0.4178409448979381
 0.3827178035453408 0.0761090708394335 0.0336752137363006
 0.0497045289306641 0.0759035525453141 0.1549159067144472
 0.2184665835138268 0.0763962261074995 0.2762451946968125
 0.1326546759300704 0.2419353839515143 0.0332449300535853
 0.2998146826591601 0.2429357126200368 0.1554292957608077
 0.4695753043816491 0.2408950742981960 0.2761280290615675
 0.8830552160494430 0.0760299845016430 0.0330115313996156
 0.5516298254609593 0.0762008290729512 0.1542263079363977
 0.7199027471979992 0.0761270232902830 0.2774524226234924
 0.6318435993978705 0.2438977105369066 0.0338510445238372
 0.7993375870237983 0.2423562221362393 0.1542968037231685
 0.9678119605362994 0.2412178412050878 0.2759650398339239
 0.3834308896183422 0.4096027641081724 0.0347203636437089
 0.0499049358125427 0.4100796866983177 0.1546879139103063
 0.2114776099330529 0.4097655644703840 0.2767368891900927
 0.1324651795303248 0.5758011956172282 0.0337836629403082
 0.3022246103492797 0.5761487206061172 0.1564906902750908

0.8827687381053934 0.4092670369675873 0.0334555748464628
 0.5487382428453316 0.4123588499302202 0.1576523575976599
 0.7199757844393478 0.4041916159449382 0.2767127689906750
 0.6320522298723682 0.5757435924929972 0.0343767481325892
 0.7991835945491310 0.5759542069895396 0.1554433267447888
 0.9640707952079935 0.5756500396638213 0.2769287607321697
 0.3833270387863438 0.7424706115737287 0.0345802343322225
 0.0494526716261561 0.7418407066396928 0.1543234455049162
 0.2100689509776244 0.7424765066552205 0.2757776599203667
 0.1325151729620362 0.9101397097948237 0.0330917651502253
 0.2996651889005146 0.9091605236805674 0.1551057080417841
 0.4700573101115786 0.9132628808242473 0.2756332392188367
 0.8824687083143616 0.7424065706736297 0.0333855679754589
 0.5489560077204924 0.7401114665101651 0.1570981560711935
 0.7202132745424150 0.7475758727354130 0.2773163347533338
 0.6319863671587920 0.9083606468684490 0.0336762679562526
 0.7991451859900147 0.9094409834418511 0.1543068290488179
 0.9673941215969790 0.9109237718945701 0.2760654794111108
 0.4621792866519345 0.5807317508316202 0.2872301126869237
 0.3988698985766706 0.4202225282810315 0.3527886591329411
 0.6179960900966279 0.5625481294772533 0.3497497104384389
 0.3213165065726408 0.7304045429427873 0.4060030462054615
 0.3006789636600708 0.8916238717846175 0.3896955300942511
 0.4315765521620508 0.8315273756029635 0.4014939113399214
 0.5122198009939722 0.5424355452283426 0.4450268254456980
 0.3531810201723942 0.8107975491138854 0.3840007137194816

(Rh SAC) Structure (13) (E=-974.59 eV)

1.000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
 74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2129490800520430 0.0802407533048971 0.0006427332815780
 0.3833387333218589 0.0789909651564809 0.1263333674863074
 0.0502254047426099 0.0790206866898212 0.2463672523907801
 0.0477818917682542 0.0780267605452196 0.0660625207242769
 0.2150379482784242 0.0838819786501992 0.1881755016333464
 0.3831779842928348 0.0784519755445876 0.3109156219888554
 0.2979172507106532 0.2439534488107910 0.0659736207348848
 0.4683921210992271 0.2459230997231869 0.1887348777032846
 0.1318205541590677 0.2443411758177353 0.3111063551060110

0.4649252644335387 0.2475431649823418 0.0018999434115652
 0.1321552217283292 0.2465195403119242 0.1243386068646201
 0.3036631874791949 0.2534609303905465 0.2474294098627230
 0.7138310306097153 0.0790481794869311 0.0023210185821571
 0.8822816619512011 0.0802226231280191 0.1246156550436786
 0.5514550675557889 0.0786279814562713 0.2477047673468745
 0.5462490293272496 0.0793943410867569 0.0660632753350652
 0.7163332582563968 0.0784107102523596 0.1883770587069137
 0.8852199183663541 0.0797114074566736 0.3121179129875777
 0.7982179252741201 0.2469528413078853 0.0658091821401657
 0.9653044770269308 0.2459441968386923 0.1874758044178765
 0.6366510054281170 0.2425819254697403 0.3131732261875290
 0.9642671004598318 0.2452563920349672 0.0012446681599187
 0.6330878101111044 0.2445346786101948 0.1251067203869437
 0.8009754972764419 0.2450730849093027 0.2472293178831146
 0.2138775476550640 0.4128457921846805 0.0023947406073942
 0.3811329142477951 0.4093024147410182 0.1260552971862778
 0.0488032683568476 0.4121858341194005 0.2468966939666870
 0.0458386636804939 0.4126222633015813 0.0659568121016284
 0.2121909692698601 0.4125142293837626 0.1871871773557730
 0.3690073491512498 0.3855353281906349 0.3258141387840091
 0.2981610235131738 0.5786687514143886 0.0672942254144441
 0.4647106002784254 0.5802236960546205 0.1833040077719348
 0.1283579921774147 0.5791082765906661 0.3128953687208438
 0.4639058479405291 0.5788837701979627 0.0021618063400283
 0.1306023806367591 0.5799949124000592 0.1249499816687665
 0.2956318340446650 0.5739446641249224 0.2492839946067522
 0.7125267526578297 0.4125817629995953 0.0018589104057895
 0.8807869290030974 0.4135710016781279 0.1255480344580258
 0.5498475387770110 0.4143857692276476 0.2522925664695667
 0.5471896574079105 0.4138197528043758 0.0679100521372794
 0.7140302979491355 0.4095790001878619 0.1888962954700435
 0.8845942006490620 0.4118747464705809 0.3113101668914053
 0.7983118167010547 0.5794968318790968 0.0654716002866512
 0.9646392661304671 0.5793788772083743 0.1889672248082056
 0.6671045316777313 0.5803041888506617 0.3260514399295201
 0.9649040266046186 0.5799944875777637 0.0013404070898289
 0.6361976990595614 0.5788638648394987 0.1263647097353932
 0.7947763101134527 0.5795874510175034 0.2469120469078877
 0.2145850625750793 0.7450377421557652 0.0021276832787444
 0.3807441832071707 0.7498623455589303 0.1250224690819356
 0.0506804992001522 0.7473859830657331 0.2467287316796105
 0.0475183722436627 0.7480521939667992 0.0659732254109640
 0.2166482195384562 0.7438771665723186 0.1883462259635877
 0.3728323691106921 0.7643337490666661 0.3147897515894989
 0.2972507529293765 0.9152799796869546 0.0651724788688479
 0.4674508112686876 0.9103091738422826 0.1889033304821319
 0.1345525945247077 0.9153627693263480 0.3115413322739221
 0.4652398009946120 0.9110407356528578 0.0019599483741493

0.1342006154456601 0.9127040921333690 0.1258891613438919
 0.2987453095895735 0.9156153775030190 0.2447881139187203
 0.7129812455314861 0.7462393683537901 0.0018658033080622
 0.8831245013613773 0.7444941996016297 0.1252711984577981
 0.5560336760823509 0.7452542547757270 0.2498916044966335
 0.5476381454616844 0.7441772038771186 0.0674583060972678
 0.7167889105315610 0.7496823883232585 0.1876459453316737
 0.8864695202085411 0.7467253145682657 0.3115821697597895
 0.7988082619778978 0.9117592344706418 0.0660800001567041
 0.9656692754395736 0.9133304905222368 0.1870234924067421
 0.6378740139252993 0.9149209011777866 0.3130248183746583
 0.9638947532886960 0.9131811297045628 0.0007952326475925
 0.6329317208861334 0.9138003209800714 0.1247433431670553
 0.8031789749376368 0.9134956947194649 0.2473144187796990
 0.4510120882122866 0.5530527554148896 0.4264404398120539
 0.5554545745302627 0.6147664832211205 0.4254131519515418
 0.3820947834296635 0.0795106577256133 0.0352092074790580
 0.0492298291740681 0.0800031096426843 0.1560716203418628
 0.2175079831384372 0.0805822792014796 0.2776720259127264
 0.1318947094849800 0.2455513815794440 0.0344954775717804
 0.2988469179257226 0.2468935825874903 0.1567482535763605
 0.4701809781518260 0.2402432446036223 0.2775789209885914
 0.8819488418365397 0.0791740280515075 0.0343873113677540
 0.5501622373275383 0.0784125608913171 0.1564085277179845
 0.7176909482119523 0.0778084127506546 0.2789503403726493
 0.6311667973825253 0.2465706695566598 0.0355367807514509
 0.7983435905895475 0.2453914155537406 0.1558077793498934
 0.9662233262332084 0.2441407858581586 0.2778777447733462
 0.3823138863232716 0.4127275992287910 0.0360324733476017
 0.0479487608693233 0.4129876309091688 0.1556379829022966
 0.2078894168283783 0.4132258306149234 0.2773202376891407
 0.1319977489241961 0.5797013420410912 0.0353503023614403
 0.3001090379486551 0.5790277440289705 0.1577719592198439
 0.8812949810746875 0.4131190320647701 0.0348762555210355
 0.5480943147803505 0.4148763307982273 0.1588654777191626
 0.7189575571142742 0.4068345024902694 0.2780166892335267
 0.6316859941009658 0.5791892925737939 0.0359049965726241
 0.7986499220849903 0.5798608030252349 0.1569203462774912
 0.9647555473123230 0.5806918478496701 0.2785811585423040
 0.3821579338198302 0.7456006132528883 0.0357507352797828
 0.0494561702735557 0.7459298944953486 0.1567080435899722
 0.2178643328211207 0.7468196291706344 0.2782870913086042
 0.1321612965000780 0.9131722772633283 0.0346813795864398
 0.2992867773440505 0.9129427816735631 0.1563907427002059
 0.4645254182397583 0.9087113719968403 0.2785529536998044
 0.8824231037648385 0.7458059708377482 0.0347625925246920
 0.5490762682880296 0.7444264807562605 0.1581035643736223
 0.7204337526381200 0.7531234273357040 0.2777832153421833
 0.6313743887332367 0.9116437466530160 0.0352301197403809

0.7996653404450377 0.9130371608430315 0.1555470871784347
 0.9695378563237614 0.9133721881887784 0.2776957610882913
 0.4610484393760222 0.5856213546687928 0.2790671306866276
 0.3865386477909419 0.4160943899934042 0.3619005743279527
 0.6323149878754711 0.5835487350891788 0.3616505913921605
 0.2991749569681053 0.5943023280463731 0.4407273276322664
 0.3719931496371265 0.7205101426236098 0.4109086436536635
 0.3903821395014989 0.6815548082846664 0.4821450514723252
 0.5868198670087306 0.5827788706001734 0.4589831530522182
 0.3746908860081484 0.6457684989474590 0.4411838612869707

(Rh SAC) Structure (14) (E=-959.16 eV)

1.000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017
 O Zr Rh H
 74 35 1 4

Selective dynamics

Direct

0.2148279217512554 0.0769954000068545 0.0025041950106366
 0.3846649521224740 0.0767840186280572 0.1281921929474188
 0.0512277659212081 0.0772539230352415 0.2477877432613811
 0.0500410122714203 0.0770481624714955 0.0682479308349096
 0.2178823696793122 0.0777179168494071 0.1908809623562258
 0.3848364875688184 0.0778790124184681 0.3114436581289851
 0.3001234477642354 0.2412425096279676 0.0671452772756587
 0.4715057105365679 0.2433166483644331 0.1903121892848309
 0.1353827839059408 0.2409643862891858 0.3123220473271878
 0.4679014716820705 0.2452890936271556 0.0038685842835362
 0.1365117715624051 0.2441393717047323 0.1272524942844427
 0.3050448694711354 0.2501582517149014 0.2476400333960443
 0.7157806258480534 0.0770358855375722 0.0044731858475959
 0.8842035825535828 0.0768678468095791 0.1266918056177110
 0.5539473264645125 0.0770861749882446 0.2498730051179591
 0.5479824403877963 0.0767961758569919 0.0680898081026536
 0.7178738513621601 0.0769069531166899 0.1901229767866210
 0.8870618636967422 0.0771656798546789 0.3140362638041512
 0.8016561287242453 0.2447167552401334 0.0676628158332231
 0.9677534372259297 0.2440228203250337 0.1885895919010757
 0.6399150145137247 0.2405187789534130 0.3148088284951646
 0.9668666301140436 0.2425693387464192 0.0026667490781123
 0.6358605495406869 0.2425482222493059 0.1262597863746957
 0.8045810406794743 0.2423978700589703 0.2487944868936270

0.2164072452972979 0.4115795594269133 0.0045438807327746
 0.3827926290744786 0.4056383599553863 0.1277483175109414
 0.0515645236222519 0.4089200376514554 0.2486756382991706
 0.0483403922044099 0.4082980897108799 0.0679719217163250
 0.2159283709532160 0.4140874176125432 0.1899751106321891
 0.3678210396660967 0.3763748994053155 0.3264023484821176
 0.3018043868644287 0.5770817120377477 0.0697263292392050
 0.4673533127291620 0.5763434211378521 0.1843859952744066
 0.1296286767212360 0.5771329625333903 0.3139710461792358
 0.4661443141665173 0.5769400889729525 0.0037565571157171
 0.1329163017059138 0.5771399111506542 0.1260727348350541
 0.3006670939038859 0.5778995680493193 0.2535165004213742
 0.7147153063369595 0.4097043283550976 0.0037616535427323
 0.8834176249234741 0.4123458855102641 0.1273459889475650
 0.5539276645397805 0.4100926354103262 0.2534779259904276
 0.5493036300841727 0.4123861774229007 0.0696920738286338
 0.7167132492763979 0.4067785714587627 0.1904976998093971
 0.8876669419969533 0.4092286835224243 0.3128543197201443
 0.8007530451770309 0.5770174466428792 0.0667173423486660
 0.9681970346691773 0.5772775936615017 0.1906311490406678
 0.6763239028362307 0.5764730520747903 0.3280107029116027
 0.9681761451100824 0.5773560447288911 0.0034471935154982
 0.6393703257811297 0.5770165554375999 0.1281208164828056
 0.7987844704203607 0.5769449096102425 0.2480332556647870
 0.2159634047131288 0.7423138194490972 0.0045173182277754
 0.3828047350874412 0.7484132926448951 0.1279634971972713
 0.0517916646603439 0.7455117637927838 0.2489027394348076
 0.0481921391538604 0.7460497564133495 0.0682367264636650
 0.2158749382084115 0.7406736477551779 0.1900093920504695
 0.3650248518322163 0.7839273260713027 0.3271224299444585
 0.2999830575278936 0.9123789748432366 0.0670917122198682
 0.4716231530174136 0.9101345040842235 0.1906380547565103
 0.1349733952921703 0.9143056267678805 0.3123672168240041
 0.4678081585446646 0.9083202495056935 0.0038752230454072
 0.1365982326194794 0.9105426563432354 0.1273538941787084
 0.3042669993573587 0.9059526751570055 0.2474953731000924
 0.7143974037951714 0.7441688420298859 0.0037568132710007
 0.8830015979029554 0.7418628435695013 0.1275245025023451
 0.5522130463495616 0.7417789746346809 0.2543809658302850
 0.5490467140145480 0.7413390240753399 0.0698929656725748
 0.7158866503864448 0.7471218820977585 0.1908839284059838
 0.8875245747271314 0.7446215968336111 0.3129034392969296
 0.8014419975902844 0.9093447056289368 0.0676441115001476
 0.9678382615560746 0.9102169922673824 0.1886476680202277
 0.6396860834626923 0.9135250588660376 0.3144463661347304
 0.9667921992514410 0.9113350349877374 0.0026563409389341
 0.6357727665883548 0.9109056902492987 0.1263680275329689
 0.8045936627919206 0.9113168632013805 0.2488935597834696
 0.4824430713900700 0.6089567163115810 0.3717172303408641

0.4199029756242122 0.5278450489123487 0.4082031997237491
 0.3840912142217837 0.0768269283499058 0.0370170775045322
 0.0512632580178715 0.0771772625158103 0.1580387061110690
 0.2198426390658872 0.0774789725678668 0.2795592615509240
 0.1343158361262771 0.2431014801418328 0.0364656446032111
 0.3014289333121116 0.2441666714930757 0.1585790762080424
 0.4714534607293360 0.2397767532406219 0.2792035545800640
 0.8844717102090714 0.0769928193438857 0.0361843359964714
 0.5528443160099140 0.0767191059755337 0.1575827781766825
 0.7210400148650792 0.0768802828996749 0.2808561433833065
 0.6335758963402156 0.2444848245821411 0.0370093833234659
 0.8010815002005366 0.2432842234286592 0.1574310997223268
 0.9694588460147721 0.2421761016972905 0.2793224371530285
 0.3846133298573483 0.4106240735387326 0.0378724005955863
 0.0509216422830040 0.4111017716991520 0.1576857743413095
 0.2120233052862830 0.4111064105835097 0.2793334416868829
 0.1342494286663873 0.5771255356049314 0.0372195770309055
 0.3033122214225756 0.5773420097678030 0.1600139392311050
 0.8840689400085956 0.4105588711761536 0.0366049422682158
 0.5508901832277493 0.4122942460395201 0.1601897775409135
 0.7223790235894569 0.4045005241108976 0.2800405779944477
 0.6337893493250273 0.5770886812633004 0.0376971610700224
 0.8007190605437663 0.5769914548789211 0.1587488565239284
 0.9659527789753964 0.5774395559483432 0.2803211367425167
 0.3847579442264304 0.7431939146353381 0.0379380550469452
 0.0509814271636616 0.7433246164222899 0.1579259945707202
 0.2129336748624315 0.7444033825438013 0.2798480965045545
 0.1343006657634400 0.9109299526519802 0.0365069706496788
 0.3011911066072125 0.9101587689107593 0.1586626855703298
 0.4707747852394931 0.9130517978660225 0.2796051735030117
 0.8841113391124497 0.7436092393064042 0.0366844035537855
 0.5504638216746320 0.7411362754028292 0.1607511639755680
 0.7214097812854410 0.7492294715141755 0.2801681863243304
 0.6334637446190463 0.9091168571567803 0.0371225809756439
 0.8009338795786868 0.9105817961300999 0.1575729471198390
 0.9695131733521789 0.9119792735094260 0.2793902339898270
 0.4655305032104944 0.5723567686709853 0.2847264883336079
 0.3852441124311249 0.4165161887279517 0.3615878644658145
 0.6176132151331678 0.5798975140513873 0.3550019042964429
 0.4705301606112591 0.5140974257596678 0.4375928881603668
 0.3991134749767093 0.7271256884441394 0.3543213517380309

(Rh SAC) Structure (15) (E=-959.59 eV)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000

0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H
 74 35 1 4

Selective dynamics

Direct

0.2112556592555875 0.0808887301619159 0.0028045347888494
 0.3875693593950896 0.0839175331384665 0.1329686276757875
 0.0506606965168503 0.0796448642958148 0.2497379981559714
 0.0494117964145467 0.0799085150376077 0.0709292678729334
 0.2151195687062702 0.0831069561682373 0.1912514451788888
 0.3836225147630757 0.0786163248455060 0.3143598730325019
 0.3021166729008739 0.2417940869755610 0.0669210465613177
 0.4803342362523776 0.2589306460396713 0.1943693345025682
 0.1351179903231051 0.2439117287158369 0.3128316620016764
 0.4694263455842126 0.2499345799558564 0.0031345825016270
 0.1390194406647613 0.2497788859560938 0.1273179129864015
 0.3071521171041979 0.2515087516561714 0.2476476825170408
 0.7157987256175404 0.0811567045089106 0.0055979511410082
 0.8807281470021928 0.0827558103156055 0.1280943334339737
 0.5494221762281803 0.0814642875607066 0.2513355074822682
 0.5462426559688492 0.0816589368958798 0.0689360792402938
 0.7167601621939004 0.0817291508416276 0.1925237017549428
 0.8848281142528575 0.0816653083326314 0.3145610618961555
 0.8037491623912700 0.2502101935610446 0.0673747119044639
 0.9700920048545135 0.2469980533222344 0.1888723690266278
 0.6403163605738291 0.2458563642276580 0.3128886730108166
 0.9696669077965553 0.2452075499274878 0.0033884269806181
 0.6381474677805414 0.2453389357317722 0.1254985663919851
 0.8059442379540923 0.2500909645532794 0.2489508375526008
 0.2151948698582977 0.4144177635802375 0.0060778589302650
 0.3807353360115839 0.4063789499710830 0.1270667746774981
 0.0506134430419272 0.4119620702591210 0.2500198531533030
 0.0450804464721532 0.4131124204295299 0.0699425724144288
 0.2151656191444557 0.4190313771413917 0.1913962128494048
 0.3526435300579395 0.3685878859478921 0.3325340988501868
 0.3048803910515098 0.5804495583651839 0.0692775561251758
 0.4709763543880039 0.5797238607727583 0.1795272227975674
 0.1358169877238338 0.5809771222302773 0.3121311905737169
 0.4686644366300581 0.5822452748967273 0.0038871585076222
 0.1363917686778634 0.5814654297001688 0.1259622954052020
 0.3159366202654057 0.5701418326242256 0.2535901664545092
 0.7143812123444510 0.4145926363832577 0.0041023162500220
 0.8780792380028520 0.4158442149307283 0.1305603259851300
 0.5375062391297871 0.4368400306444134 0.2725845752796371
 0.5485402063752101 0.4162254981994682 0.0695108796647009
 0.703524100330170 0.4111286506005287 0.1952440319780298
 0.8873319880084066 0.4145444875870675 0.3138956461151111
 0.8058491960163252 0.5814472536036840 0.0657174733539523

0.9720592791060069 0.5805384279389074 0.1902102652069091
 0.6978597905518411 0.5849912430335100 0.3313372866725600
 0.9723193519984329 0.5816481017366653 0.0028610505434283
 0.6449211266746495 0.5806675977973432 0.1258663492064817
 0.8032145763481385 0.5811726376904535 0.2465808103967480
 0.2171195865466184 0.7483243016614410 0.0065240642855856
 0.3811605562055905 0.7542012333392847 0.1279402777482264
 0.0517074850627698 0.7499888913672881 0.2488055418107495
 0.0476883198314192 0.7500175598999953 0.0692433636914151
 0.2199087401423286 0.7394920522181979 0.1927150803598164
 0.3729441274119404 0.7593473916616625 0.3166865529484670
 0.3032407993795056 0.9218982776546393 0.0679411891996202
 0.4752336208029875 0.9093038260985999 0.1921987287239579
 0.1389678775695022 0.9142454150239486 0.3132704297031543
 0.4697815626171144 0.9122563665411428 0.0038134813968574
 0.1404268933782806 0.9112325922589343 0.1285475770138451
 0.3044516536643363 0.9156547980862372 0.2474322363047655
 0.7142551361399615 0.7485409318491749 0.0042283058655031
 0.8830430990366773 0.7456900646749193 0.1290392539393210
 0.5543653247295186 0.7367549894858370 0.2565348265160705
 0.5497873905176034 0.7466795607957231 0.0710450855074745
 0.7147184107262641 0.7518673821555630 0.1912808582082210
 0.8902080765408947 0.7485830493093502 0.3134422773845715
 0.8035391900930925 0.9124652383892664 0.0679437995856877
 0.9697409764774469 0.9150212635947479 0.1880912721944096
 0.6407665510289143 0.9167184082559063 0.3135175116199282
 0.9692061913888225 0.9164997356586112 0.0033873461966730
 0.6373567414987467 0.9188731012192618 0.1268781896977421
 0.8073165263793758 0.9145947097528988 0.2488343206116372
 0.5075147929100706 0.5895701408043086 0.3662000753874117
 0.4237835020488979 0.4162569749130115 0.4328527757866929
 0.3867679396215072 0.0818339697555233 0.0374184615930035
 0.0520021021910325 0.0810637574044512 0.1596747297466775
 0.2213479356136794 0.0806281042711451 0.2808996810102554
 0.1341078619050560 0.2457076456110936 0.0371725722657776
 0.3006046405930311 0.2483502821595459 0.1597528814277129
 0.4699397913932101 0.2485264161904037 0.2829311053445536
 0.8855198297426499 0.0813889253219059 0.0376667417853840
 0.5535177560874365 0.0827969072587638 0.1606866524056288
 0.7211226666188360 0.0813533321464950 0.2810619453440005
 0.6349400976636004 0.2475290171601164 0.0368627705687769
 0.7997711723554050 0.2483247884848873 0.1594438401856041
 0.9681235591084758 0.2462280831228792 0.2802407274082340
 0.3841115876163813 0.4137913384682260 0.0374476023848918
 0.0518942505960800 0.4150347480732869 0.1589796672261636
 0.2124563148604839 0.4111216402925418 0.2810294149523130
 0.1339467669319365 0.5816717848315555 0.0379745889925784
 0.3061686852326660 0.5796634924402999 0.1595200911631089
 0.8847085966289272 0.4146928351318196 0.0373999466413470

0.5505507486943437 0.4181827148960655 0.1561566590656995
0.7196400937096429 0.4138533920017109 0.2830275272350776
0.6356682824770989 0.5828961047406409 0.0366623480188411
0.8014795310387538 0.5825615422125077 0.1592170950028026
0.9666360689433520 0.5811244539975969 0.2801967040923451
0.3861270878053750 0.7482884402507555 0.0386623358026830
0.0532815266122159 0.7465599210621026 0.1590937455808950
0.2175766341144151 0.7473561206011951 0.2806216310090806
0.1353207264138635 0.9159188780949620 0.0375138253778927
0.3026916616173159 0.9150945313399903 0.1597142092339657
0.4702423474140905 0.9122209417645435 0.2807042838960654
0.8865850175313994 0.7480096694053191 0.0371207462553683
0.5522481327277216 0.7442480365236919 0.1609855038993072
0.7236106097889830 0.7527254376390607 0.2809388657744044
0.6336242479234528 0.9140670847600132 0.0381857832164870
0.8015291641652874 0.9149035337580116 0.1581953230959731
0.9706473303605443 0.9143557747391878 0.2797547546229019
0.4503062597869966 0.5937972503567663 0.3007436660135205
0.3654119873446483 0.3828146076429216 0.3720070944629091
0.6315033003526990 0.5862594838260136 0.3537769261311618
0.3838759963425820 0.4437418980737957 0.4642713614385107
0.4588700372387526 0.4910867997280040 0.4175114766573494

TS₃₋₄ (Imaginary frequency: 599.20 cm⁻¹)

1.00000000000000
12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2119573006131526 0.0787219131247494 -0.0008019380627392
0.3867926557845391 0.0809927387702598 0.1281804484457684
0.0511135005076032 0.0769134032359780 0.2455213028837387
0.0487208245318987 0.0775415751348639 0.0662822802828306
0.2152351071089049 0.0813880227005755 0.1870555518456335
0.3841799398217293 0.0756904575712021 0.3104292480787295
0.3010061779212703 0.2404034999063346 0.0637646637896844
0.4772774153308448 0.2546051233001885 0.1899798121939964
0.1337530815406103 0.2421461760982815 0.3088821180960738
0.4680860731947866 0.2475662867011272 -0.0001513349561097
0.1370027172771829 0.2466734166415232 0.1232396368855053
0.3062213963589398 0.2495231050490770 0.2448644629996825
0.7150268143321984 0.0786861431777164 0.0015974310301507
0.8811793158462615 0.0799675559206953 0.1239433043344264
0.5499522744336500 0.0787740461058750 0.2468721489496582
0.5460755429327744 0.0787083668498392 0.0649301812786172
0.7168150416871776 0.0786386796821160 0.1881374492526152
0.8853503258293209 0.0791469621632918 0.3104538238265221
0.8021172205656950 0.2472107244046466 0.0638779757745136
0.9688200492758162 0.2443400477632300 0.1853185467937630
0.6394570455993757 0.2421992602476866 0.3095878979396506
0.9678937423463563 0.2432904838808587 -0.0003988066551963
0.6365196217727300 0.2429370447743648 0.1222495084187966
0.8045533434471235 0.2470091725687746 0.2451777045537834
0.2146385058531037 0.4117164757834961 0.0019911146344351
0.3803215906956067 0.4058035881905300 0.1237959771996700
0.0497897934042073 0.4104631005955868 0.2457911610851395
0.0449012134644276 0.4108826538506609 0.0657394378828954
0.2139045484799708 0.4140175178062170 0.1870135046994280
0.3553525324548218 0.3677053662778120 0.3285429129649067
0.3025639823821613 0.5780830739955670 0.0654743147278449
0.4690316213756662 0.5778971703475836 0.1785472484525519
0.1333277751042381 0.5781342434427461 0.3094866600781678
0.4672311054011113 0.5790294838279345 0.0004335533789825
0.1348009666270439 0.5786242775106166 0.1226279443736159
0.3066667960018253 0.5702950400210063 0.2485061905309349
0.7132150778860440 0.4117882373673651 0.0005299293768161
0.8783431201206334 0.4130358822028219 0.1262815710284188
0.5407374244986215 0.4310119147400606 0.2656428870419491
0.5477395936565889 0.4137499817737376 0.0664812034968760
0.7051959673009831 0.4086534427333087 0.1905711877340588
0.8868632079687454 0.4115051415200978 0.3099817431463327
0.8034641767911560 0.5784794061673394 0.0626073289123343
0.9697511285574234 0.5784280652080263 0.1865327323275304
0.6924783784858148 0.5816315123570345 0.3274051406070946
0.9699069774089236 0.5789425274659551 -0.0006606407212069
0.6421559416954556 0.5786265185727217 0.1230074469196502

0.8010832290410129 0.5787234300832752 0.2435842969769615
 0.2162587521958387 0.7456809332508758 0.0022174673540336
 0.3813101605595577 0.7504721283020411 0.1240558224117230
 0.0518492676957529 0.7468253462204892 0.2449266631644350
 0.0476000015938040 0.7470979763323323 0.0651343935851998
 0.2186299624707732 0.7399964117146827 0.1877439851653690
 0.3750763148587419 0.7557896806609000 0.3110344321959105
 0.3017693728319655 0.9180996724214195 0.0642153145622877
 0.4729167101794776 0.9072379073011938 0.1881168968035819
 0.1383296837011548 0.9120311179946509 0.3098131438346226
 0.4682665993936462 0.9097594823129747 0.0001343984944997
 0.1384414962142948 0.9099910168977525 0.1243638726611404
 0.3028295968203783 0.9138920092033551 0.2435711535818592
 0.7138260276505626 0.7454728475575271 0.0005045254865394
 0.8829290055277822 0.7431931455701255 0.1245874294398850
 0.5568452568688570 0.7374498868598305 0.2511900552585831
 0.5490936855629004 0.7440727508553598 0.0669103713634618
 0.7159788398655414 0.7493312038026315 0.1870144375935931
 0.8897862460215857 0.7463357384400424 0.3097170081450145
 0.8019080014603625 0.9101858528219130 0.0641893871836929
 0.9687178182815611 0.9122094884426155 0.1845483653976285
 0.6404290820494710 0.9149051981017348 0.3100168351718440
 0.9676882335412408 0.9133570513168758 -0.0003972552339917
 0.6359350830498147 0.9154496646605043 0.1232341406358012
 0.8066326357096446 0.9122277051508830 0.2451795813487771
 0.4909854412302947 0.5667111524579292 0.3673076367597991
 0.5068592101351117 0.6716770621940373 0.4006219755675201
 0.3853376272263477 0.0792687417839342 0.0338380182807786
 0.0512661147410058 0.0785883478704830 0.1553806617532185
 0.2203971376629263 0.0781861378553189 0.2767337050164415
 0.1333326493421700 0.2435103115891767 0.0333356025039540
 0.2999477018096908 0.2460208406679066 0.1559373064069136
 0.4702313800702980 0.2442862178871065 0.2784491541696864
 0.8843321930507454 0.0786943574600946 0.0335817873852220
 0.5526531596424795 0.0796620593774357 0.1563499641936116
 0.7206441730968534 0.0782792154333190 0.2770702254983966
 0.6337093748263215 0.2450369304139534 0.0334432677142387
 0.7991514898149252 0.2454214460312513 0.1553198669091826
 0.9676062967789691 0.2436047515457931 0.2763424177527093
 0.3832960468430142 0.4116481426579703 0.0340258805726534
 0.0504362108784027 0.4122602950055826 0.1548489910357158
 0.2104103126016752 0.4097129745713574 0.2767192797094341
 0.1332767321752153 0.5790305058081905 0.0341681681124945
 0.3041211738148675 0.5775551256339827 0.1560655301336553
 0.8834636087255675 0.4120404386522694 0.0335982242754305
 0.5492607718439969 0.4161332269633271 0.1537992036240748
 0.7192816209384706 0.4100226462314160 0.2785952766045307
 0.6343726730889563 0.5799026426539734 0.0334191264380083
 0.8005861503761648 0.5799700801975186 0.1555724596709585
 0.9661066940905638 0.5788589191032195 0.2766781889442269
 0.3849413261525293 0.7455368092456792 0.0347873692381802
 0.0519367940816998 0.7443940361401876 0.1550584752495892
 0.2177785429562295 0.7440102658206070 0.2760265027217939
 0.1342897808580458 0.9131032168159250 0.0335623976087451
 0.3017474257525755 0.9124575894182038 0.1555975131442486
 0.4696811203585335 0.9091481144028585 0.2766756290188763

0.8851553381987315 0.7450526519050823 0.0332967114134861
 0.5516449333615254 0.7421747385933684 0.1572699684360168
 0.7234921065883989 0.7511876973494979 0.2771451621211963
 0.6327062614182887 0.9112672440657190 0.0342535761140697
 0.8010661697327329 0.9122251526817745 0.1542193895275248
 0.9709542175172639 0.9119200005887693 0.2759838117646276
 0.4542869774862371 0.5917896491472129 0.2896382667235883
 0.3801835674341684 0.4154922833879579 0.3596883102194157
 0.6334608455172945 0.5778611113195257 0.3534381764012531
 0.2862807810247886 0.6916185084119981 0.4553704770187897
 0.3125497607365261 0.8341101512512610 0.4146742114394923
 0.3841389499175143 0.8086274284885336 0.4797084492458843
 0.4305589134311733 0.7029840531724288 0.4154593033711233
 0.3378258623095970 0.7702953706486995 0.4463651152893841

(Rh SAC) TS4-5 (Imaginary frequency = 409.75 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2141223123476016 0.0787795100884593 -0.0005887870273779
 0.3879651116713703 0.0795569573999216 0.1278152377970002
 0.0528226442000552 0.0759628434019844 0.2458244440957524
 0.0507635392830279 0.0764997692387141 0.0662816345588934
 0.2165167670531184 0.0796179759169430 0.1869806804275715
 0.3869153041458037 0.0747815828125404 0.3099467238130036
 0.3026703650365115 0.2407642541265527 0.0642121651362089
 0.4772901040632380 0.2511478063773156 0.1899557236976992
 0.1352307107714703 0.2405973601972986 0.3095469927178197
 0.4699472210635823 0.2478459192573877 0.0006013487701622
 0.1381288092352015 0.2456060180277315 0.1234257429861736
 0.3061541697049274 0.2467594533167222 0.2446132069588840
 0.7168568262625664 0.0782638016333138 0.0021684829055849
 0.8837238875193704 0.0795446590957268 0.1240464681765567
 0.5535623264715068 0.0775641063462260 0.2470618199279227
 0.5480747919265186 0.0789583099386010 0.0654007702958640
 0.7193369962700967 0.0775003124966404 0.1882261286909798
 0.8873391974303965 0.0782103241107451 0.3111926677601111
 0.8032912846758052 0.2468366197062073 0.0644926067068105
 0.9705107052640571 0.2436245616732478 0.1858604468825018
 0.6395246682582191 0.2440830515675917 0.3095143607349746
 0.9692846606012815 0.2430315818354080 0.0001520860158907
 0.6379722782345478 0.2428956648720426 0.1234584600281593
 0.8062318565542774 0.2450742147366782 0.2458640579429060
 0.2162193555292332 0.4114435851553072 0.0022962515696583
 0.3825025121551553 0.4054818566910932 0.1249852735321162

0.0517342785837629 0.4092156166237498 0.2464073302569460
 0.0469909341005197 0.4104968916333818 0.0660343655674593
 0.2152247078076356 0.4129410906643240 0.1871545839270297
 0.3591640018942523 0.3629531306886786 0.3274697552653331
 0.3039136022319880 0.5773175729195635 0.0660105928169312
 0.4690314460749312 0.5802433959261962 0.1790051313907692
 0.1346964054605787 0.5774070647168482 0.3099503421318363
 0.4687355042631416 0.5781407197783651 0.0009310791404692
 0.1359694618346788 0.5783426868289872 0.1230347981120955
 0.3072784201898962 0.5680146123339025 0.2492405794743554
 0.7147399370314560 0.4115207667897602 0.0010807523221129
 0.8810457175765510 0.4125702498380168 0.1263031808892662
 0.543421821886131 0.4308096856679358 0.2596036509928314
 0.5497134457844426 0.4138147293574936 0.0678587655541273
 0.7101600151968486 0.4077314438183032 0.1904597645132699
 0.8880475578909005 0.4109205986958847 0.3103126826932538
 0.8041610244132747 0.5780916892059388 0.0634401144383444
 0.9714442755664416 0.5774762607727533 0.1872198596052525
 0.6896460801830123 0.5801936265443481 0.3273611224866165
 0.9707219398288958 0.5780105428281889 -0.0001006244526259
 0.6431235553583956 0.5782041769273295 0.1244957711527733
 0.8028882743909883 0.5786882955207946 0.2441436501551667
 0.2181840252698662 0.7445591110059941 0.0022241002650584
 0.3827132085824060 0.7504735960266347 0.1238317839966557
 0.0538092985040701 0.7461342707324503 0.2453614778602199
 0.0495449198046032 0.7465232819338354 0.0651058407812765
 0.2207145414998691 0.7390846801834053 0.1883502085722514
 0.3805850250117800 0.7540091062741621 0.3097828035702382
 0.3026464314561084 0.9173735707968395 0.0641735183911586
 0.4740114244370124 0.9070951331406805 0.1882723424232481
 0.1397849618128887 0.9108615829731399 0.3102212627301197
 0.4701380738699581 0.9097877386004111 0.0007636965213172
 0.1397016434864034 0.9086894290545224 0.1246258392973751
 0.3039732139296973 0.9130104072767611 0.2439992908378971
 0.7158916656297709 0.7452916997733972 0.0010050465994432
 0.8855845204785060 0.7424247229396498 0.1248232737445634
 0.5596537158450131 0.7369572611891925 0.2504803652990159
 0.5510167000240196 0.7432200219706855 0.0670786918066548
 0.7186886945859700 0.7495580905311110 0.1870574857820574
 0.8912732463868376 0.7452505812338502 0.3103825529433630
 0.8038315110961785 0.9097389865085017 0.0648112636468008
 0.9701064214841087 0.9115054940518343 0.1850887445544261
 0.6418064774668991 0.9130370546784161 0.3109415495980227
 0.9688653173993370 0.9129690983182562 -0.0002268581805510
 0.6375314163613797 0.9148788777836254 0.1233582117936953
 0.8081287252866778 0.9119181865897132 0.2459405094890244
 0.4923589135142172 0.5445712595539250 0.3617249711372903
 0.4563634177716405 0.6249884717299916 0.4119573669956267
 0.3867960907569897 0.0788877946913898 0.0343429311358862

0.0528471038852303 0.0777662999910108 0.1554245154163128
0.2213452499800765 0.0768119967117508 0.2767767263212721
0.1353033464494912 0.2434696993858936 0.0334854530708134
0.3012200566667363 0.2449424417056625 0.1559479282584821
0.4710977538352102 0.2424110289302480 0.2782658113292619
0.8859870194073780 0.0782547994712775 0.0338166666396409
0.5544406880942576 0.0792177042292867 0.1563375454013498
0.7222487142615002 0.0774151653892984 0.2773751932705109
0.6349109068030515 0.2457134829837193 0.0345459934830814
0.8012080388926934 0.2447760905588010 0.1555082765113864
0.9697605234882987 0.2423928282206929 0.2768525191716327
0.3860745121610276 0.4114697109457572 0.0350148273862597
0.0520786825463132 0.4113884914466054 0.1552634205063726
0.2130712601766781 0.4078400197276169 0.2772034849645855
0.1349014984240950 0.5781878220840472 0.0344267890537153
0.3048348636305144 0.5767913364145776 0.1562641045372543
0.8851771141424417 0.4117275248636076 0.0341735876374521
0.5505797904371484 0.4164399004411659 0.1571357501390550
0.7225398422412990 0.4092412285082129 0.2784767205474376
0.6357495379759927 0.5787303917179395 0.0344577444020324
0.8025981092265164 0.5792962689561882 0.1559149459193223
0.9689972748135688 0.5780392951747793 0.2771065626683473
0.3862423628317161 0.7450037716617722 0.0349765964290062
0.0535253183916987 0.7436527782034920 0.1553711071406542
0.2202393044536862 0.7425857038263712 0.2766813744394954
0.1359053341133106 0.9124206239075482 0.0337139221424891
0.3031094240486540 0.9115078326559384 0.1558084322368859
0.4712514012499034 0.9093813227010846 0.2766353957261382
0.8865535066987514 0.7446545473608156 0.0336628841068659
0.5536173878118966 0.7426642908118848 0.1568418696276214
0.7260793298387946 0.7501336817190810 0.2772354129075784
0.6348371818146217 0.9111536101498594 0.0343819127358756
0.8032438758229243 0.9118745591177307 0.1545276829281831
0.9728564125169351 0.9111335736715336 0.2765725542940956
0.4600015974566786 0.5929164970747915 0.2864974852872247
0.3935663488558802 0.4208917964310515 0.3530684076054016
0.6232567398232252 0.5713210829861723 0.3489395317773542
0.3968717844070441 0.5958546096327039 0.5116440973295686
0.3144480404431475 0.7110627674308332 0.4731970133110636
0.4466138801433764 0.7581594860848678 0.5010369020250549
0.5266096671095050 0.6546246051395077 0.4230535722904026
0.3892725485223671 0.6855468520443611 0.4919207967268344

(Rh SAC) TS₁₂₋₅ (Imaginary frequency = 381.86 cm ⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2139913345078765 0.0759854577029343 1.0000468920765435
0.3847521546411177 0.0750906874050371 0.1261286024315365
0.0514206073002333 0.0738020709995784 0.2457636300260408
0.0490462956177520 0.0745436401577665 0.0658246853983602
0.2167618740867912 0.0780700606128682 0.1880107611994269
0.3837848817060951 0.0729814738289038 0.3105888631045568
0.3002784527290058 0.2395104736716562 0.0649195203911061
0.4716404076304563 0.2423523981730856 0.1883596663593779
0.1341553268041560 0.2389355130126673 0.3099639445512871
0.4676445734831758 0.2437716901701575 0.0012539244409117
0.1356078372006154 0.2423041672931470 0.1240214743319513
0.3057406618876259 0.2478009459882557 0.2461346383227732
0.7152971100260543 0.0750939610370027 0.0020762635747455
0.8832944984134434 0.0759060975864986 0.1244930963281926
0.5522399393446596 0.0748636780165110 0.2478483923846453
0.5474460726802907 0.0753961329855859 0.0658443139349449
0.7170571007330419 0.0742340680051023 0.1881555433984110
0.8868447831678377 0.0752889694231108 0.3117425003571646
0.8011114884806815 0.2430185537633546 0.0651304009447966
0.9681719987636407 0.2417764069631125 0.1865457962751737
0.6395970833696999 0.2383749352462774 0.3124198461757379
0.9665708305359104 0.2409206060002370 1.0002961858912029
0.6357958468092044 0.2405607161725421 0.1242705152060171
0.8040190766550439 0.2404302746789524 0.2462752534522088
0.2154032667372225 0.4092104459109718 0.0021474263036454
0.3823129456417206 0.4042072039518316 0.1255706433404017
0.0510480959675725 0.4076780621797842 0.2463954708335825
0.0470706529443481 0.4072895012069489 0.0656312017221838
0.2147594878444059 0.4097397992440205 0.1872034259781967
0.3646254671581691 0.3730177362263374 0.3261324205308603
0.3016314121635182 0.5749861282722365 0.0667148675723456
0.4669060016110078 0.5760179122476159 0.1818879392409070
0.1306273076147212 0.5750440201773598 0.3120798950693239
0.4664087003622246 0.5747828432631088 0.0012518029130917
0.1333806269756406 0.5750782994266809 0.1235496383442683
0.2992594712374320 0.5721810264219729 0.2495405696596335
0.7138721218572681 0.4081296805443395 0.0013674621353346
0.8821798344146196 0.4097016266683255 0.1254217294024817
0.5507953873601412 0.4112139709796764 0.2530482828473406

0.5486621470230769 0.4102423583792318 0.0677631357310292
 0.7148167354707781 0.4053597228929255 0.1887868402459827
 0.8874794705149780 0.4070154093902746 0.3104279549474470
 0.8009207214692623 0.5750022504249716 0.0643093691385758
 0.9687296866438019 0.5756269334451546 0.1879029967085517
 0.6797308351367956 0.5744278220288314 0.3257170626499034
 0.9679477522940076 0.5756883400073023 1.0007154248302297
 0.6394163469998579 0.5749163951000430 0.1256569797127670
 0.7999314858385882 0.5753938952047011 0.2453748667886429
 0.2158693309945966 0.7408125306414836 0.0018607169895901
 0.3822294424523451 0.7466427087404524 0.1248085548092213
 0.0522793605509552 0.7439306460088855 0.2463735976969831
 0.0483896566071991 0.7442745072553675 0.0656790211269172
 0.2168141869697061 0.7386537291437114 0.1873047994005820
 0.3693146793866285 0.7688420539563571 0.3193468854102358
 0.2998890811956647 0.9113930991779771 0.0641951516237331
 0.4713045123664490 0.9068631882138173 0.1882385236162449
 0.1375597484650292 0.9112868632091419 0.3111737587583024
 0.4680335247814274 0.9069759436267124 0.0012623404945609
 0.1367986342394813 0.9087680669432715 0.1248845426313498
 0.3026528218496763 0.9074981781285758 0.2436263899859273
 0.7144540082236867 0.7423342775341248 0.0014072928793593
 0.8834427723987996 0.7400013912528924 0.1248617485208144
 0.5556067875309538 0.7400675908549784 0.2510122434697931
 0.5490000836630274 0.7396485859615426 0.0672243750575105
 0.7170408977526346 0.7454521406445455 0.1879290539321528
 0.8884957295296713 0.7427071867755116 0.3109066329725695
 0.8015698994335713 0.9076878166403040 0.0652488567438902
 0.9679009322846053 0.9083366442468982 0.1859776633182894
 0.6402193720922464 0.9111681331405660 0.3122256872426900
 0.9664997730684918 0.9094176468335817 0.9999909252859391
 0.6356427302570096 0.9095611485894611 0.1238091977867311
 0.8055574264094896 0.9091347195303292 0.2465672677167150
 0.4854921523322994 0.5639752711066366 0.3725955372773396
 0.4839987607017465 0.6806798287602158 0.4018644653541001
 0.3841891402763721 0.0755230039555035 0.0346255068027723
 0.0510336740046694 0.0754620436091576 0.1555870372858271
 0.2197433040529529 0.0756417026930923 0.2769357175799994
 0.1336531021970011 0.2413570219580254 0.0339597156895979
 0.3008404386573317 0.2424364234770414 0.1562117521347815
 0.4716587842787218 0.2380321090347642 0.2773361304309748
 0.8839569020000960 0.0752051812486346 0.0338991915802860
 0.5524057453189363 0.0746809478361730 0.1557653626901501
 0.7202896849923893 0.0741220141944959 0.2784661013247980
 0.6331075124552900 0.2427332075161376 0.0349811470647873
 0.8002204510767608 0.2414075247665348 0.1553642438680376
 0.9684822758867276 0.2399857578403785 0.2770622749468714
 0.3846367214449621 0.4087145974385208 0.0355397802907383
 0.0504785055675099 0.4090314639037413 0.1551516578597529

0.2108446033764309 0.4083785230068014 0.2769255506247146
 0.1338906953161253 0.5753865906937879 0.0346591426025299
 0.3028756548573974 0.5748611069566123 0.1571225295838812
 0.8835084025887749 0.4087199819252415 0.0342807241816174
 0.5499855398567669 0.4114186457542549 0.1586806276473698
 0.7212462369926417 0.4031299928799136 0.2776888425660586
 0.6335455907538582 0.5749173241115121 0.0353251419540735
 0.8008134034757119 0.5755539789562110 0.1563081499884117
 0.9665078676592332 0.5756518218763230 0.2777854623791602
 0.3845512858554893 0.7414972739218499 0.0352774641974608
 0.0512785614852545 0.7414113754803664 0.1555256492365732
 0.2164000868608069 0.7418817374600583 0.2768124465253162
 0.1338647177960189 0.9092957769317055 0.0339345747267745
 0.3011334103813168 0.9086681290475650 0.1556072372905095
 0.4686299384861068 0.9072126658726536 0.2775487127087735
 0.8841174571498803 0.7417085410747019 0.0341457742378807
 0.5508919964271494 0.7395032535907585 0.1578761121713727
 0.7226062140160074 0.7473788201740447 0.2776289938320823
 0.6332921530310746 0.9074825798677500 0.0346709614780160
 0.8010827252485496 0.9087358986031147 0.1550597842449598
 0.9702735131706232 0.9092981001592165 0.2769993997052227
 0.4609784171770475 0.5822950631405280 0.2833363529597555
 0.3881076351556742 0.4218059265091774 0.3574804784752261
 0.6190779566990147 0.5710849003634946 0.3514586582267832
 0.2986983226571975 0.7037012714195139 0.4179390869194368
 0.3106777352308590 0.8597825097081173 0.3874224304940896
 0.3969440928076857 0.8183304168866189 0.4437238808966114
 0.4823494646623233 0.6500639500632290 0.4393675470568907
 0.3472306400807131 0.7855210706544223 0.4103911576414024

(Rh SAC) TS4-13 (Imaginary frequency = 283.55 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C

74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2136781705054800 0.0783282993798793 -0.0000301522370551
 0.3870566842287019 0.0788717238229255 0.1280590837958029
 0.0521933287831256 0.0759923842094057 0.2461258903124180
 0.0496145296454095 0.0759268134734636 0.0663586712900931
 0.2159314604062413 0.0812494511030073 0.1875166680367261
 0.3856913428543849 0.0758684084819966 0.3109828416144176
 0.3015899557475424 0.2404869905821707 0.0650480810505938

0.4758797151530472 0.2497955887683857 0.1902544609122095
 0.1343999180011554 0.2412718840638066 0.3101999776781073
 0.4685307515253911 0.2467041612356781 0.0011973367473283
 0.1365587359622690 0.2451873660140252 0.1235894643659298
 0.3063317808438847 0.2490875019738445 0.2459218233608466
 0.7156812073259536 0.0772409765515211 0.0023973540480008
 0.8827707381733407 0.0785134364967651 0.1242832313952206
 0.5523049279772074 0.0764315126910284 0.2477335829849224
 0.5473358155475928 0.0776885557500983 0.0658720175256494
 0.7182531055773892 0.0765754180081929 0.1887286283213485
 0.8867454056167434 0.0772774845611780 0.3115386997413529
 0.8017344549758809 0.2457629209924941 0.0649151972723365
 0.9692542779597371 0.2430329045336216 0.1862135795496206
 0.6398237553660974 0.2413528569292795 0.3109608236593217
 0.9677027066896772 0.2424433140241634 0.0006344859041406
 0.6366692201556244 0.2417105001551852 0.1240156811769163
 0.8053473683411648 0.2439212549716318 0.2461812217552664
 0.2154963245931915 0.4106794156450734 0.0026476942446306
 0.3817704833082661 0.4058931922083741 0.1255316707224611
 0.0503205158051799 0.4089659133623345 0.2464856933720703
 0.0460891561810115 0.4105510460339188 0.0660838713414452
 0.2137848356329188 0.4117990991767935 0.1872404440609054
 0.3611512273546088 0.3733608159253498 0.3271269534157308
 0.3025342324667256 0.5768362061453578 0.0663996752085287
 0.4681932175216244 0.5785070721372199 0.1806711679729193
 0.1326480198210734 0.5769537884054576 0.3108047074452803
 0.4677188576526147 0.5773278415041357 0.0016160679104836
 0.1349884263452250 0.5779097099895460 0.1235532262092738
 0.3033977030646786 0.5689643274563628 0.2485886955046002
 0.7136598790117149 0.4108275946927383 0.0015820912872650
 0.8802494051277299 0.4114297378685924 0.1263795160419367
 0.5449396092572113 0.4259560450221992 0.2605485041945690
 0.5487706446783667 0.4124836899847625 0.0683440206384717
 0.7099684576893177 0.4069025140953290 0.1904652065725029
 0.8875615098560807 0.4097873666891264 0.3107611696529646
 0.8027234707539974 0.5773872979361153 0.0641139558602652
 0.9700014985395911 0.5767862917352816 0.1873749863490922
 0.6889080864127655 0.5770490452299286 0.3279400674706949
 0.9689258476530584 0.5779244703779435 0.0002754454637197
 0.6413976388971909 0.5772759764093561 0.1251305805029926
 0.8015956893389803 0.5776127202248690 0.2446747236603239
 0.2171628217661952 0.7441007162624982 0.0024851637665803
 0.3818546690975531 0.7494625578236332 0.1246656736710314
 0.0516278005872439 0.7452405613819022 0.245566535585189
 0.0486830981564068 0.7460643133032472 0.0655084512948120
 0.2189892568529292 0.7403757800962273 0.1884247813297484
 0.3736470751190597 0.7557579873729630 0.3099989403050816
 0.3013617627677330 0.9162099720729322 0.0648092337362706
 0.4721699756746273 0.9063702644218606 0.1890581642453739

0.1375831537655376 0.9111737142101212 0.3104819518894366
 0.4686807276843712 0.9088487466655695 0.0013377916415522
 0.1383043280084829 0.9093501745841017 0.1250225468077956
 0.3022602329763964 0.9148185832712717 0.2443491535835594
 0.7146076431882555 0.7442523436717629 0.0014995351791264
 0.8844058642039909 0.7419593195129618 0.1251796676958487
 0.5584861069373928 0.7386000567986815 0.2516925417776829
 0.5498575888990267 0.7424981762400734 0.0677997842603846
 0.7175886365104673 0.7479405252084214 0.1875395494535030
 0.8898662104350593 0.7446366977626325 0.3109635308152212
 0.8020569376703832 0.9089790277116894 0.0652371794419713
 0.9690273292111522 0.9114312833415822 0.1855306352050194
 0.6420625905211881 0.9132883277704203 0.3119225312983646
 0.9672554157343805 0.9120287213141853 0.0002178444884174
 0.6361120897669844 0.9135170377852939 0.1242145096512641
 0.8069121281413185 0.9106440311679267 0.2462116227060167
 0.4940291326098389 0.5852736803758160 0.3709621899136058
 0.5147473643287197 0.7080142195969451 0.3929924057964809
 0.3855390056321348 0.0782000727785261 0.0348760647989834
 0.0517878441595646 0.0775840741741558 0.1556480203055881
 0.2206202828915247 0.0775710165734176 0.2772845980508868
 0.1340855256405755 0.2429630206157213 0.0338847215740503
 0.3005775948490763 0.2449506336145305 0.1564680867422772
 0.4717944356540711 0.2406491361195234 0.2783342074530039
 0.8845772827567029 0.0772924152094034 0.0340269361947988
 0.5533679121918902 0.0776499461954125 0.1568117951181477
 0.7213447316391406 0.0758734148960293 0.2781339278159461
 0.6337966655362109 0.2445338974929805 0.0350217377196475
 0.8001585820943484 0.2435499955159310 0.1557372205546395
 0.9687128483114362 0.2416325995108706 0.2771455433585555
 0.3848372006641102 0.4108759844549750 0.0354927310101184
 0.0506762988387704 0.4108958990167878 0.1552722448737705
 0.2103434103989086 0.4089902296052414 0.2768760958760971
 0.1340883415251176 0.5777711849450579 0.0347733699342825
 0.3037807578171717 0.5769443686836624 0.1568444237066322
 0.8836554032414354 0.4109919355112022 0.0343716460247246
 0.5497674433063602 0.4153708464956846 0.1575081132981747
 0.7220837069328500 0.4069987753537315 0.2785008497430819
 0.6344119736880668 0.5780786933368052 0.0351064573043185
 0.8015478019786240 0.5782925726494570 0.1562942488066174
 0.9670875073742010 0.5778081914861154 0.2775552231653168
 0.3853026142213454 0.7443705710454585 0.0355451155341040
 0.0522105839151378 0.7434117149631425 0.1556353791612713
 0.2175454307172647 0.7435654654738666 0.2769142376552096
 0.1348864088682726 0.9118429065392586 0.0341615399704912
 0.3020349171094810 0.9115045910031004 0.1563351586329991
 0.4693418949673371 0.9069326115140048 0.2778273272062987
 0.8852289861006888 0.7438208641684768 0.0339996527987269
 0.5520125011902470 0.7416053948421960 0.1582568130137268

0.7239895915724854 0.7495638327924782 0.2773624347790085
 0.6335487477229369 0.9099563929432030 0.0350331088376440
 0.8019990086211005 0.9109585807956233 0.1549800028264665
 0.9717036630746820 0.9107288151446319 0.2769152606430503
 0.4545466216901699 0.5877251950844919 0.2877780342784937
 0.3791025015653008 0.4118665647798565 0.3617512910628617
 0.6225095564786968 0.5682423480077573 0.3492075576096083
 0.4205157915378334 0.4021317041042460 0.4473423768158425
 0.3155203574039540 0.5190536616644174 0.4289391031392087
 0.4374163773645228 0.5699564269544480 0.4657878417713610
 0.5896413023282646 0.7010671771126455 0.4037603247815990
 0.3950308105940497 0.4984115651515863 0.4437232161125371

(Rh SAC) TS₁₂₋₁₃ (Imaginary frequency = 437.97 cm⁻¹)

1.000000000000000		
12.604999542199999	0.000000000000000	0.000000000000000
0.000000000000000	10.774800300600008	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	24.727600097700017
O Zr Rh H C		
74 35 1 6 1		

Selective dynamics

Direct

0.2132067506424406 0.0784321665960333 0.0005641741236443
 0.3839288599213786 0.0778866032523501 0.1265645146645132
 0.0503729738997611 0.0765780107943108 0.2461058341965839
 0.0484381383550234 0.0768496606683664 0.0662702480483803
 0.2154951507095509 0.0800267696680588 0.1881757029406831
 0.3832096557598941 0.0760726500522669 0.3108450576907882
 0.2986442823175633 0.2421088481364927 0.0656821455443381
 0.4699426866923607 0.2449991490533661 0.1890562270004488
 0.1323859400641347 0.2409993467928596 0.3105788675257890
 0.4661332808576207 0.2462805511272038 0.0020641379205996
 0.1339388081572456 0.2448180290523029 0.1248586596466279
 0.3034599154247198 0.2491415332808460 0.2464544228244178
 0.7144466420226737 0.0774624437303252 0.0025571969406491
 0.8825513297028423 0.0782537221012297 0.1248128506616574
 0.5515803350739200 0.0776425200317898 0.2481939624983807
 0.5467307833451706 0.0779032132101360 0.0662327461525952
 0.7163387773127714 0.0768155967160219 0.1884961901395690
 0.8857698067146716 0.0779583340638205 0.3121797162306474
 0.7994948725950032 0.2452757971810082 0.0658864975294978
 0.9661930369974149 0.2439988211042966 0.1872189310032166
 0.6376072633397110 0.2412631165341474 0.3132132152738817
 0.9651023443438053 0.2433960121370381 0.0010722410019393
 0.6340522218803353 0.2433007983278572 0.1249628914739487
 0.8019607291693762 0.2432551503671935 0.2470632492194909

0.2143655310791755 0.4116167610188329 0.0027334085817330
 0.3815154162342071 0.4068648197735157 0.1262623633967458
 0.0496144734794063 0.4097723747492055 0.2469076518368229
 0.0461575852106077 0.4098081451422599 0.0662894282165075
 0.2136695947981630 0.4125657328770235 0.1878181110772678
 0.3620694656946272 0.3733643570766673 0.3264790792490618
 0.2999127883464387 0.5771869976360011 0.0676673360661826
 0.4658175702170229 0.5789686958398487 0.1830042029193563
 0.1285796733174838 0.5774095927694989 0.3125202480051025
 0.4647348607566474 0.5773659774940249 0.0020771858302035
 0.1316592154001610 0.5777409505380828 0.1245643864257972
 0.2987695744858929 0.5737041838300168 0.2508677842488572
 0.7129324409852297 0.4106262192866473 0.0020063815661428
 0.8810833113342214 0.4121904012841229 0.1259128713689081
 0.5492699764986807 0.4141739565934779 0.2534592311483440
 0.5476831764176531 0.4128381346470300 0.0682453349960316
 0.7137264011067377 0.4077978213426331 0.1892182850048800
 0.8854609978672219 0.4098851301135801 0.3109792968147217
 0.7993587953076046 0.5774920469589765 0.0651395626786594
 0.9663322075246680 0.5776352161572778 0.1887490475880514
 0.6735168068517808 0.5780899900006815 0.3259136160393023
 0.9664045986325458 0.5778230475086915 0.0014854886457397
 0.6376411993755519 0.5777485214105232 0.1263699619900250
 0.7965421179095761 0.5780512018298284 0.2462945148228048
 0.2153841895339459 0.7432473630375767 0.0025316357116419
 0.3814056494097404 0.7491038797906074 0.1253577710539188
 0.0509090809115662 0.7458911058786254 0.2467260414987258
 0.0476412912210911 0.7464096169338008 0.0660142874058607
 0.2162891637232564 0.7408877645330678 0.1883202846242095
 0.3688651347705752 0.7693323088663269 0.3190247208376111
 0.2982705921591279 0.9142617348630228 0.0651979497002478
 0.4692681282574848 0.9099288840511692 0.1888175684073713
 0.1350504556124005 0.9133734470678101 0.3113245453440961
 0.4662767619669254 0.9093628157245618 0.0020984248881161
 0.1350540541550604 0.9104348280188373 0.1256345118090244
 0.3009930517371484 0.9103884978606119 0.2448005223823779
 0.7136345592479382 0.7447033669257909 0.0019670267940556
 0.8827994373903262 0.7424146958003212 0.1253304482022846
 0.5552701772740758 0.7449225731032115 0.2508837881933591
 0.5481763866022573 0.7422621961465403 0.0676178101726972
 0.7163015161950819 0.7483783718178741 0.1882923264579994
 0.8869589833262553 0.7452451187291188 0.3112743765878843
 0.7999194503909598 0.9101219733004530 0.0660078492074818
 0.9662113267612569 0.9109628528447418 0.1867354814832128
 0.6387956944460617 0.9142161878315981 0.3132311499629338
 0.9649230062885037 0.9117238363795924 0.0007441349274368
 0.6339125995171855 0.9121319280707127 0.1245446884773577
 0.8037954472907264 0.9120786069387129 0.2472710173496537
 0.4412303285319567 0.5871611165091964 0.3745383320995003

0.5313380088007903 0.5672860383695467 0.4106814161043176
 0.3828975411848222 0.0780252426113568 0.0352461324231100
 0.0497456292931988 0.0778356711892078 0.1561191821161995
 0.2180605558328959 0.0779170532187900 0.2775152792690217
 0.1326249102366180 0.2437714972886973 0.0346323146114904
 0.2995144500100748 0.2448366782836633 0.1568193086027022
 0.4697253864107161 0.2407875904527554 0.2778810182293113
 0.8827194522420353 0.0776094992337560 0.0343909650639572
 0.5511494614407317 0.0775240879297386 0.1562108903161052
 0.7188040334843657 0.0768857087650361 0.2791165659377808
 0.6319220366333566 0.2453354409042036 0.0355908063944442
 0.7990222735984226 0.2437713569449424 0.1558534065919107
 0.9672710869453388 0.2423299925046033 0.2776678403408108
 0.3833840379364699 0.4113782446415709 0.0362247852831352
 0.0489376456876952 0.4112193550493584 0.1559157542976300
 0.2098381987741118 0.4105887144071588 0.2774552421359994
 0.1327735714855077 0.5777104162321814 0.0355422559541050
 0.3018646674804745 0.5773340614648780 0.1582552963974211
 0.8822541513629801 0.4111971918270841 0.0349521465744030
 0.5484456689485340 0.4141219438337352 0.1592605029658991
 0.7196953124410470 0.4053725242569874 0.2780206616474298
 0.6324990132788799 0.5774985625731436 0.0359603564299778
 0.7992762777924834 0.5781394253684593 0.1569024154978401
 0.9649057576182399 0.5779905367176302 0.2783930227478573
 0.3831035448398198 0.7439399619148862 0.0359223490185349
 0.0498802066711430 0.7437677578477238 0.1562330162368685
 0.2150405040067500 0.7437773677164428 0.2776605232834162
 0.1328944377774838 0.9116755706181371 0.0346323011608037
 0.2999299397419919 0.9111810282797332 0.1564003616485450
 0.4669951665979301 0.9110526224158718 0.2779592885780009
 0.8830407206275002 0.7440858036743138 0.0347506792459462
 0.5496151601649217 0.7427137037457140 0.1583292989589718
 0.7215215210950973 0.7513584927647038 0.2780602523330525
 0.6321063149624085 0.9099973893246247 0.0353044504640304
 0.7999590168958038 0.9114298057526278 0.1555788871026459
 0.9693904104660508 0.9118110352581602 0.2775571054060189
 0.4634791128408122 0.5881512197615993 0.2840217512301698
 0.3853419650348391 0.4341213408945581 0.3539110649000695
 0.6347022977864143 0.5742585916752883 0.3604402767855491
 0.3025307559387486 0.6778852407389838 0.4167387789863901
 0.3405790636539137 0.8348754134627921 0.3966849743233164
 0.4369944342761840 0.7364976479810985 0.4318065903388928
 0.5071332079193660 0.4988555236593730 0.4336494954291199
 0.3667060897182472 0.7412227042233467 0.4061602968259110

(Rh SAC) TS7-8 (Imaginary frequency = 1254.84 cm⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C
73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2110978788681135 0.0785527331204934 0.0007282572376680
0.3848432028532247 0.0796845439362102 0.1289687221366722
0.0497514277912054 0.0755559243475136 0.2470416331229589
0.0476099483679108 0.0759025054488034 0.0674557959875542
0.2132033574128533 0.0790365542496047 0.1880143250578889
0.3839680206840384 0.0744359133287840 0.3110441754071970
0.2991024623770812 0.2406608469216606 0.0656863645059018
0.4738003429358828 0.2514606973299633 0.1913631110422715
0.1317217526331317 0.2401019404797292 0.3108444405202429
0.4663868865453839 0.2475900619888058 0.0020654510652233
0.1342327118513221 0.2450011246134055 0.1248020016834741
0.3024476497740569 0.2458644868980347 0.2458297988015394
0.7138055126803157 0.0779063789561651 0.0033354040910528
0.8806868917187544 0.0792141748299557 0.1253758491295573
0.5505399861195160 0.0779100124805267 0.2480541077119078
0.5451078251595511 0.0787118881012543 0.0665921171375063
0.7163816030402932 0.0773147498539501 0.1895060821059672
0.8844186756488447 0.0779227771418380 0.3124809951058584
0.7997702559961504 0.2462064339312869 0.0659243669725219
0.9668399044298416 0.2431457589243377 0.1874983024652872
0.6356171384260852 0.2438290866905970 0.3109416888401267
0.9655377511426427 0.2428168888402064 0.0015254198555788
0.6345846935057878 0.2430192657574510 0.1249154582100851
0.8024567033888305 0.2451925587390507 0.2475360234895075
0.2129939130460430 0.4110785533742114 0.0035512709641403
0.3794887221869322 0.4055909492024380 0.1263388894302041
0.0485336423627939 0.4090140492638801 0.2477151854763475
0.0438805095170772 0.4102718126271808 0.0672279557663870
0.2119488114634276 0.4119451243164074 0.1882911925452889
0.3557758504845698 0.3624215789947232 0.3284756494305998
0.3002740836461412 0.5769748121563493 0.0674321122343267
0.4656532921872477 0.5800886848503710 0.1809832873266344
0.1311599932347840 0.5772837975911960 0.3114480162220323
0.4653340015671799 0.5780432037693747 0.0024507097778597
0.1321334936643382 0.5777069909404529 0.1244932774044074
0.3026232877269668 0.5678253075843631 0.2503251064428503
0.7115198825939731 0.4112448080168106 0.0024698550706106
0.8779124370887910 0.4120215598540735 0.1275455008911988
0.5404790669390579 0.4313693866203668 0.2608906492235121

0.5465214990662565 0.4135939170178002 0.0691524183949653
 0.7070722392136132 0.4076457684564436 0.1918885130441558
 0.8847006804714626 0.4109017134956553 0.3117407992155572
 0.8006436208674028 0.5776879488552730 0.0649556763407524
 0.9674159376909615 0.5769672109924124 0.1886283800002377
 0.6828660426261334 0.5813860791202115 0.3287196965941062
 0.9670925122479019 0.5775887447994505 0.0012747506909376
 0.6394445951948521 0.5780870803987083 0.1259244218674576
 0.7986506301372823 0.5783581237998786 0.2459607627642389
 0.2152910993281536 0.7442552812117609 0.0034642940708572
 0.3799003187896924 0.7500835861868974 0.1250255107874137
 0.0507905835755031 0.7454088276745574 0.2463792901310244
 0.0465787020402330 0.7460019101876976 0.0661854621720649
 0.2173978716467303 0.7390541964323121 0.1891938851141472
 0.3783603254911713 0.7539923854913463 0.3105619048764562
 0.2989634296647717 0.9172497991541279 0.0655816383969048
 0.4704439166211034 0.9074625340279184 0.1892913931559901
 0.1362902909017334 0.9099305315067667 0.3114026341311235
 0.4664879754919250 0.9097603356742175 0.0021477174466250
 0.1358710255268476 0.9083139110936975 0.1258898908865992
 0.3004560742685510 0.9124039245689561 0.2452211928407947
 0.7129863353580885 0.7449028234419022 0.0022471794667229
 0.8826560241148427 0.7420530990838715 0.1259327912644271
 0.5567729024225495 0.7377952329766043 0.2509189528220752
 0.5482043862857754 0.7432462979676144 0.0682195334137229
 0.7161454674843477 0.7490853205938454 0.1882458405661882
 0.8882344599395904 0.7450329037066482 0.3114943309407738
 0.8003400118472037 0.9095140056471553 0.0661676234049360
 0.9665559408177791 0.9109466262412149 0.1865575005279437
 0.6378223235313256 0.9131203736119644 0.3119364528037149
 0.9652538858821275 0.9121572779689889 0.0010335587637213
 0.6342667036697583 0.9146980712879080 0.1247892432883934
 0.8046096974105671 0.9120196296225815 0.2474135217512978
 0.4778829555259027 0.5523043849237542 0.3623687442345181
 0.3833727179029512 0.0787389878796210 0.0355755733343276
 0.0493982304919765 0.0772783084966032 0.1566330046041324
 0.2178825200782739 0.0764255632103074 0.2779093614509081
 0.1318562378606287 0.2431378040075191 0.0347892670708215
 0.2978694251472820 0.2447188602576390 0.1571902054205983
 0.4674802775638874 0.2427787985393338 0.2796375899085113
 0.8825035798545864 0.0778196865034070 0.0351143541164788
 0.5511641075021505 0.0793432696753077 0.1574576594464374
 0.7189007181232762 0.0775889576214685 0.2786431383977206
 0.6316674129889822 0.2455735359772594 0.0359394869927713
 0.7979366535255973 0.2445232772988929 0.1570024901926265
 0.9663980736832130 0.2420637985544786 0.2783620967257678
 0.3826662056367661 0.4112217844841873 0.0363397814843248
 0.0486709963230793 0.4108317657373675 0.1565896326229103
 0.2099516217417559 0.4075327531215922 0.2784523247844501

0.1318006036121147 0.5776779773176990 0.0356990063882411
 0.3015347433843442 0.5762192077784054 0.1577140394000977
 0.8818216339529030 0.4112893750792174 0.0355049968131530
 0.5472174525677372 0.4164548559371423 0.1585197724546417
 0.7183268333710133 0.4093877445495356 0.2800819904261651
 0.6325269595407400 0.5784542099469615 0.0357985570276102
 0.7993033352471915 0.5789394909517293 0.1573086130735109
 0.9656044899990432 0.5774167045632320 0.2785443024872966
 0.3828854544618575 0.7448062720213325 0.0361829131007120
 0.0499832159957824 0.7432163038608487 0.1564393248791847
 0.2162710712909444 0.7417856487784219 0.2772239806075741
 0.1326154242309231 0.9118940185243216 0.0349835800497979
 0.2998591382222836 0.9113208354398626 0.1569040875679870
 0.4685358658663201 0.9104873327645473 0.2774954546578344
 0.8832953684275581 0.7441719281626884 0.0347882990642400
 0.5504545094282162 0.7426911919262617 0.1579695438319720
 0.7227807458399915 0.7501928178698769 0.2786257254857264
 0.6317645438604070 0.9109211158117837 0.0356697512308875
 0.8000623914350458 0.9114798896316038 0.1558384883399966
 0.9697335451997552 0.9108099600676914 0.2779673618800573
 0.4584130106565375 0.5947070767539350 0.2870566956075125
 0.3908107989092826 0.4240387477682318 0.3524918733684331
 0.6197434319913613 0.5770783715043305 0.3526544966250735
 0.3778785042814947 0.6168752423700056 0.4657118504447991
 0.3157989102129937 0.7209497441814141 0.4158538850652779
 0.4467010673001912 0.7588089285186388 0.4435011433472604
 0.4358208332663732 0.6210275951213261 0.3946684433894168
 0.3891155243622560 0.6862069032135594 0.4338725843047184

(Rh SAC) TS₈₋₉ (Imaginary frequency = 356.77 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H C

73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2134495274730478 0.0794232747905936 0.0016070483518473
 0.3864444447661584 0.0743520705905818 0.1293455113986430
 0.0517966625066840 0.0731044942349682 0.2477096445558076
 0.0496533501609884 0.0720461800786645 0.0678209185185964
 0.2141590500888459 0.0794540223525699 0.1876838930534651
 0.3867925392478380 0.0724307892169812 0.3114918811811841
 0.3004609388772171 0.2405245866942635 0.0682002020515246

0.4689259654296505 0.2466788009511154 0.1915969837160425
 0.1305122058940056 0.2359553511987191 0.3134931496835082
 0.4654900195112004 0.2461967395609711 0.0028258627097919
 0.1326323078946157 0.2431914610719415 0.1250353294984159
 0.3000961824072155 0.2432580931877629 0.2477245279027067
 0.7153920365377219 0.0753147096335818 0.0039789357605795
 0.8825572305626204 0.0783972570801234 0.1254314833000421
 0.5531096846735274 0.0781241711960146 0.2481511054336367
 0.5470036447899033 0.0792636778013700 0.0671504556224358
 0.7188112397352975 0.0746980178779274 0.1899164103118556
 0.8859930320013861 0.0763790530217479 0.3134021362484280
 0.7974018585115206 0.2446547488808482 0.0673031671611521
 0.9667028244290516 0.2409937198340157 0.1888944353499346
 0.6337589613496978 0.2464533866825586 0.3117411811308851
 0.9651830544511482 0.2409522731297777 0.0035917969504709
 0.6331926761749778 0.2432573761742390 0.1277583464154439
 0.8021044912595777 0.2429446564145190 0.2488840208754253
 0.2145412688034214 0.4087401925610397 0.0042459391038394
 0.3837353939959225 0.4075298598050822 0.1279989462915559
 0.0507927647531392 0.4059936652042489 0.2486858236456182
 0.0455721847432823 0.4100931236999179 0.0674922341534291
 0.2130185742043252 0.4086713859014213 0.1878678664738574
 0.3611134839780172 0.3618586660628275 0.3295368937095137
 0.2988615657224980 0.5746959255692089 0.0688269599111156
 0.4619548422599330 0.5863630522304517 0.1852159555867111
 0.1281314494839597 0.5771062955519326 0.3133697005901601
 0.4647309223084155 0.5767942569756066 0.0039126721559634
 0.1313168547195826 0.5770117869821108 0.1256668494252675
 0.2985132913992957 0.5565688282896561 0.2543998012257837
 0.7132628511219542 0.4103902925950641 0.0029045048522215
 0.8803659029876140 0.4097666681700513 0.1275758627548272
 0.5421352034671504 0.4282512501075639 0.2542194931932233
 0.5484934025946626 0.4110677319720953 0.0693499015805147
 0.7128081896123831 0.4075246468524242 0.1920253172149240
 0.8855258351615286 0.4094759345603553 0.3120280794663690
 0.7983092716322266 0.5763658152461855 0.0671637668930513
 0.9672208266253606 0.5737760393870919 0.1900687416850223
 0.6816246026149324 0.5757914637834640 0.3302640746413018
 0.9648000671202770 0.5762186255611981 0.0025395160394194
 0.6359053479121333 0.5750573405903451 0.1284926034132770
 0.7992174151017640 0.5795944598933762 0.2474478661392699
 0.2169025721383908 0.7418301614200961 0.0037146936397417
 0.3806406275202440 0.7495246346348909 0.1247497952091624
 0.0512513569632739 0.7446868741270805 0.2463889777308256
 0.0483416943328448 0.7448025385608188 0.0662013931395670
 0.2202752859157353 0.7345106975939049 0.1911118109104072
 0.3782566216195455 0.7551281375228979 0.3079539749334390
 0.2973605614034909 0.9159412665766087 0.0659541775836004
 0.4716630747111195 0.9031570109144401 0.1918998398084535

0.1363472048472364 0.9066074381186912 0.3128758378403850
 0.4667940214924167 0.9082981226410601 0.0038461683893628
 0.1364253708639246 0.9045236808356963 0.1277876350399997
 0.2982210723701434 0.9136621693475865 0.2454109288081021
 0.7139580495124784 0.7434270936131155 0.0029158309150693
 0.8855753796725223 0.7396846838790559 0.1264951951338666
 0.5674904422309639 0.7350497522380809 0.2548095782970006
 0.5501572055200288 0.7413362587744134 0.0692036800794630
 0.7184139526845080 0.7483368551365982 0.1877967179836895
 0.8918076536483103 0.7433019184515748 0.3137364318184911
 0.7997197747190787 0.9071877544143224 0.0679189642277787
 0.9657002837900476 0.9103259795236188 0.1875195494039314
 0.6379034030217721 0.9160007804631234 0.3140396195849990
 0.9635574775905527 0.9103192407990149 0.0019063842618852
 0.6329066555195612 0.9141635188531251 0.1256788557027803
 0.8049032555337696 0.9097198639230466 0.2493473451721738
 0.4720809710096838 0.5698825162174028 0.3563680990648014
 0.3835211899617521 0.0775332191510093 0.0366640879823042
 0.0501015309926803 0.0756236145374271 0.1571452179617527
 0.2175850216497119 0.0736133958964461 0.2784103307722395
 0.1328075685899570 0.2419388896270784 0.0358200936486072
 0.2990506189902867 0.2432147768619885 0.1581873466190983
 0.4677095195274238 0.2417827969374086 0.2802895075091382
 0.8824187626826547 0.0756001525427151 0.0359235676842861
 0.5515864373747618 0.0778391926097794 0.1583430446005992
 0.7194762394768807 0.0762938448765489 0.2795473316137899
 0.6318608717067122 0.2450534979227981 0.0373266559385452
 0.7991111140624827 0.2428618020269493 0.1580204244266832
 0.9670646063246542 0.2400342791759708 0.2794747787014712
 0.3843219087549139 0.4097483968609535 0.0374612420581342
 0.0490353705451373 0.4084736258967466 0.1573689396112183
 0.2100432546787457 0.4017915446046967 0.2806603090194489
 0.1321518520470206 0.5757349954271954 0.0365295756930224
 0.2995493666556714 0.5738398700528812 0.1580089173860500
 0.8814492635624283 0.4098649566893014 0.0366630674759327
 0.5481220113706777 0.4142230651807067 0.1619362425106760
 0.7192451472586038 0.4093266934826758 0.2807248378703016
 0.6326907738160232 0.5760913499614694 0.0370966142134801
 0.7997573891249909 0.5771367254305525 0.1584793384840342
 0.9674953707855211 0.5757129773054833 0.2799393082181628
 0.3825387432049723 0.7438233659077689 0.0369873802123381
 0.0495458436742322 0.7412806394577373 0.1574167649723498
 0.2156070255390183 0.7395614457713501 0.2786866907840216
 0.1335150441341248 0.9098992468617992 0.0359219210368238
 0.3004000081264894 0.9089685073961308 0.1581870587639328
 0.4713454565670013 0.9104938841932966 0.2791201708372844
 0.8830967782780846 0.7426175426164431 0.0355854557595726
 0.5528558732286120 0.7434189099068144 0.1581737662684733
 0.7261646215844387 0.7471546661288861 0.2812253052049152

0.6328132882874952 0.9098193758952444 0.0364177226997554
 0.8013230289552298 0.9099902955707201 0.1569439364052910
 0.9704857187734346 0.9092448730874015 0.2791963984813420
 0.4552526114480742 0.6005010265244186 0.2729764438062762
 0.3956813839935224 0.4352405263033186 0.3468711447872687
 0.6099025127289852 0.5763603371598096 0.3476477599262356
 0.5034596846204817 0.4229143095246983 0.4390098232832323
 0.3818881440036347 0.5193644125759467 0.4497468214128561
 0.5164934549083551 0.5891274247899567 0.4601080336071558
 0.4356402134079375 0.6466518468756629 0.3672186583481558
 0.4675512421007350 0.5136795875141541 0.4448279798194739

(Rh SAC) TS₁₁₋₉ (Imaginary frequency = 500.87 cm⁻¹)

1.0000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017
 O Zr Rh H C
 73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2151119123999756 0.0756655106838203 0.0004737443282793
 0.3856454217949553 0.0753008146223873 0.1262808589326099
 0.0521208415409174 0.0738304807344991 0.2459355572751996
 0.0500094032666793 0.0740669404969235 0.0659742120323367
 0.2170480611254054 0.0763697279923435 0.1878748204094473
 0.3848165625125485 0.0732663556020555 0.3105263404951597
 0.3004565362907701 0.2394984717495877 0.0654226846083413
 0.4714843631284165 0.2427368882516373 0.1890111332035356
 0.1338404408367301 0.2382152743883170 0.3103664903534190
 0.4679508067708774 0.2436119555791217 0.0017846755432846
 0.1355429092332779 0.2417867085867908 0.1245597241488920
 0.3045082466179582 0.2450663948355926 0.2459581779727212
 0.7161036103245220 0.0748065201171687 0.0023539691676740
 0.8841060682462765 0.0755161367546343 0.1244339468726335
 0.5533253519819783 0.0750053339451257 0.2480179405291186
 0.5484601605263653 0.0752627744400906 0.0660314215142143
 0.7181012188201294 0.0744052709153891 0.1882890776208234
 0.8874409625079765 0.0752779697085556 0.3119402576779148
 0.8009594854877163 0.2427247192990639 0.0656588742866360
 0.9677135288572267 0.2408254288561926 0.1869491084367376
 0.6391047700426669 0.2388019564583035 0.3129683634103326
 0.9666028891230546 0.2405656070127245 0.0008625120458553
 0.6356021560616687 0.2407910183110618 0.1247734824446043
 0.8034941678891441 0.2409060244636657 0.2469239868254062

0.2161004062640135 0.4089298064888245 0.0024908323487916
 0.3831630598378934 0.4041860509948559 0.1259677607982683
 0.0509764109905308 0.4069498794230482 0.2465772308661314
 0.0477857282430784 0.4070672780769080 0.0659853841272874
 0.2153572267139232 0.4091250949940505 0.1874600733155283
 0.3629411903550318 0.3702023512779102 0.3254686209337619
 0.3013214903617952 0.5746313302672477 0.0674194000985738
 0.4673592622253352 0.5764943131535927 0.1827805065562788
 0.1302113248370924 0.5745335602741114 0.3120193239391919
 0.4662431980539218 0.5747477265519718 0.0018708116070655
 0.1330793302710994 0.5746400689556672 0.1244467743548043
 0.2995767343208386 0.5711078455326960 0.2500745555850746
 0.7145447600101853 0.4080244192427049 0.0016877925040592
 0.8827586603371433 0.4093889948196853 0.1257443538885788
 0.5513784793113963 0.4117555528074047 0.2533320908329229
 0.5494002620305787 0.4103247976868857 0.0680040514590459
 0.7154930863650544 0.4052748618882586 0.1890532643602098
 0.8871405394573249 0.4073636989709860 0.3109171249460285
 0.8009032257073138 0.5746760881880685 0.0650560840262333
 0.9675764590131630 0.5749414492436205 0.1886221357535385
 0.6752881214477156 0.5774434154425260 0.3265059715440272
 0.9675960618155015 0.5752108662128879 0.0011410780860505
 0.6392387777424615 0.5751901542985843 0.1262218354243421
 0.7978961101405073 0.5753009414737400 0.2466001911849928
 0.2169419472794290 0.7404948866262140 0.0022699999285509
 0.3832414831550188 0.7460998120339426 0.1251207265681454
 0.0525978217574165 0.7431642847064597 0.2463441674810621
 0.0492685433252174 0.7432386222505063 0.0657891618905094
 0.2177022919937863 0.7385144648081003 0.1877280562982443
 0.3711065766057434 0.7663289910104305 0.3190058453525566
 0.3001737828767903 0.9112204150626279 0.0648913939147217
 0.4708247535283125 0.9074805010534740 0.1885448646447246
 0.1367699505346427 0.9101970408383927 0.3111284962665885
 0.4680759943574918 0.9067294623796254 0.0017991503173986
 0.1365692454477952 0.9076408523900682 0.1251230486245309
 0.3028511365141663 0.9069210434965003 0.2445779449352604
 0.7152951992929067 0.7418179367494953 0.0016366509278528
 0.8844403089209053 0.7396742769603336 0.1250931356380022
 0.5571222687716408 0.7424638079210791 0.2506318873150005
 0.5498673776254295 0.7396793230405653 0.0674131945472786
 0.7183100203581967 0.7455892086424458 0.1879419909845760
 0.8887809703232766 0.7430067528951333 0.3109566290693320
 0.8013961643021876 0.9071088877007566 0.0656870321017285
 0.9679635838879828 0.9083030324397737 0.1864409187774186
 0.6406634192204622 0.9114359765352564 0.3131341907450548
 0.9666183231973451 0.9086724427788747 0.0006346692555904
 0.6355524617896672 0.9096584391527238 0.1243954666324075
 0.8054969681264328 0.9100488465981642 0.2468612938231126
 0.4436194525339062 0.5765119706172261 0.3727373959276319

0.3846281798000148 0.0753390081402943 0.0349887587114710
 0.0514271726322605 0.0748005420363644 0.1557935370106279
 0.2196938246370037 0.0747512722996635 0.2772203382322290
 0.1343181562044743 0.2409825707344011 0.0343185091705214
 0.3010913993680081 0.2418866724390832 0.1565304650182493
 0.4708193925059527 0.2386710415289552 0.2778097663396760
 0.8842958927122430 0.0748376384135247 0.0341328804653791
 0.5527786261773351 0.0750828097892886 0.1561233968459936
 0.7203382110805222 0.0745251241669586 0.2788954576829660
 0.6334889366622543 0.2427062944990908 0.0353983691782950
 0.8006497503917543 0.2411020378313848 0.1556111571201962
 0.9690161894582431 0.2396618821731769 0.2775445453545498
 0.3849708601887490 0.4087271053310008 0.0359679140287977
 0.0505613731692578 0.4083242669975352 0.1557434242691227
 0.2117299457625204 0.4072589475104957 0.2772592370081430
 0.1343828379384438 0.5748078470145972 0.0352714927020204
 0.3032032090362724 0.5744212543796209 0.1578459260214772
 0.8838029604305453 0.4084733973613464 0.0347242970541678
 0.5501438109707851 0.4115161317905580 0.1590583501686607
 0.7211561845996429 0.4023680122816222 0.2778869564645443
 0.6341598201164496 0.5748829425187008 0.0357397304239570
 0.8009212805645278 0.5753858221531116 0.1567946611814913
 0.9666941470886092 0.5750749443227382 0.2782214580858646
 0.3847539586184786 0.7412562651193857 0.0356643221923843
 0.0514001921146741 0.7409900694886523 0.1559255201404559
 0.2164533055657468 0.7405073292644366 0.2770072038538910
 0.1345318730434419 0.9087186841105935 0.0343637722414761
 0.3016035874870405 0.9084059183381721 0.1560615585425505
 0.4685932241183406 0.9085790476290712 0.2777569583219224
 0.8845088840513742 0.7411781125297425 0.0344258844892172
 0.5512476935089768 0.7401220892492495 0.1580344531114500
 0.7233630242332475 0.7494957139316628 0.2775388560183397
 0.6337598885178770 0.9073609816248054 0.0350285721589172
 0.8017021291338902 0.9086873286063483 0.1551392424823806
 0.9710503146591113 0.9093310572200022 0.2773536293462298
 0.4638072878094986 0.5856373899923240 0.2828459914983414
 0.3873307319233142 0.4335912135520399 0.3520738262647390
 0.6199872426028697 0.5801147624967855 0.3541887255943720
 0.3355849624958373 0.6546394939298599 0.4290301847031899
 0.3034096667045260 0.7978665111497522 0.3941376668869493
 0.4389507110082895 0.7733021328918410 0.4174252482258424
 0.4871108133538296 0.5539758420929016 0.4040040871323929
 0.3648578524112314 0.7311139578920060 0.4044459192848394

(Rh SAC) TS14-15 (Imaginary frequency = 564.28 cm⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Rh H
74 35 1 4

Selective dynamics

Direct

0.2116924735394689 0.0798290720557786 0.0028580859950531
0.3869946637418554 0.0819776642798088 0.1321814245437157
0.0509622203429286 0.0778981149498927 0.2495971964533207
0.0492082258190198 0.0784410142510072 0.0703817467354225
0.2149040715774169 0.0806727291978350 0.1908023162179847
0.3844525282176426 0.0771372672389314 0.3139810632932256
0.3013463291935455 0.2411660707399557 0.0672555263713252
0.4779905327701288 0.2555322079977798 0.1940510584788609
0.1345264741046624 0.2422202494792652 0.3129027314404407
0.4687696230266659 0.2491787218524041 0.0036054086761556
0.1376958163214742 0.2477977833741878 0.1272661218101589
0.3054446453230462 0.2484831305317293 0.2475115635149665
0.7154962217379408 0.0799268968831606 0.0056412714611421
0.8811700771459328 0.0810229609225993 0.1277118467902347
0.5503427436145313 0.0792877480500319 0.2509168879347476
0.5461551445367477 0.0802771740310671 0.0687794484501025
0.7170890345424404 0.0798930161253630 0.1920610622195090
0.8851188067630101 0.0800606199990434 0.3146413113872644
0.8025191466608320 0.2487281330683474 0.0677708754697830
0.9690311278547854 0.2449228778200207 0.1890461696718729
0.6383201077326975 0.2459019917027102 0.3127739541963292
0.9683364686923561 0.2440827373060613 0.0035259408403545
0.6369005298271168 0.2441120132538130 0.1261622941630208
0.8050914637104313 0.2476052253416345 0.2492464478690457
0.2148617394565918 0.4129501845619232 0.0059242311208898
0.3806188070854363 0.4059377241337759 0.1276369638930426
0.0498105225184433 0.4101045746527830 0.2497925200572472
0.0452121818716800 0.4116754778745519 0.0696634347996924
0.2144396459966452 0.4163553468870389 0.1910585953921066
0.3561516914580628 0.3699067853494817 0.3300870230588709
0.3034494811159577 0.5789878361586753 0.0692545645706834
0.4690526183112926 0.5798428410134312 0.1811989448354683
0.1342340702062635 0.5790141391254672 0.3122636251393706
0.4678518779486044 0.5801853436001829 0.0041583958536810
0.1352301684262993 0.5798686799897661 0.1261262803860261
0.3098127134720289 0.5703273202342377 0.2525538586318217
0.7135018207404040 0.4130409919249203 0.0043348324137995
0.8788730810831373 0.4143170941542774 0.1301779291123160
0.5396234939560135 0.4349326293436436 0.2672421258550572

0.5482183512934740 0.4152327017717426 0.0705303575463047
 0.7060791341807388 0.4092094881202620 0.1945082534058936
 0.8866459802659099 0.4128761512838540 0.3137787595749911
 0.8040557622491408 0.5798247334991591 0.0662663811778985
 0.9709809575222209 0.5792380101889461 0.1903802070411289
 0.6937545056971859 0.5833576177882442 0.3309356244684493
 0.9704941726349969 0.5798720971428771 0.0031213357389023
 0.6431200038092426 0.5795871549902966 0.1269370695849586
 0.8020250011278071 0.5799603244472737 0.2469345923744957
 0.2169663563501965 0.7466370457807180 0.0060992019562496
 0.3812464448173428 0.7523406119293392 0.1274751806758698
 0.0521130444507226 0.7483156304857207 0.2486409092769061
 0.0477792687386724 0.7483277422178910 0.0687450234501355
 0.2193488499742689 0.7399151491496091 0.1919622420695828
 0.3767113973526750 0.7534162418854997 0.3144562788764557
 0.3020320312175829 0.9198547093910608 0.0678924904505797
 0.4735278315629690 0.9079655150965075 0.1919667549775687
 0.1386479570888005 0.9124252233638099 0.3134328409939084
 0.4688721674895994 0.9109917748462756 0.0039652622053225
 0.1389657675178868 0.9099899835969029 0.1281751088690598
 0.3037622573684818 0.9139948410929329 0.2477601522891660
 0.7141863378997100 0.7469936371356345 0.0042502880819528
 0.8835546662684929 0.7441880897971634 0.1285361277600926
 0.5567307934461565 0.7369697178313345 0.2551051208121767
 0.5496648278925422 0.7450586426574262 0.0707374463775718
 0.7161157647007779 0.7509044569858258 0.1907763769272699
 0.8902140594021675 0.7470936940290452 0.3133530998288011
 0.8024942262271512 0.9110453025366838 0.0680796353945218
 0.9689545169381290 0.9133903395840572 0.1883547748931057
 0.6404245222455526 0.9151319145064946 0.3138322903747044
 0.9679449245213945 0.9149205207735368 0.0033391653781765
 0.6363569732489838 0.9170431369183669 0.1269156635355345
 0.8068143787262042 0.9138188979667411 0.2490886714355442
 0.5056376550106798 0.5905775450266754 0.3697135410117459
 0.3908822203206728 0.4737934742587402 0.4231435230741617
 0.3858035401270206 0.0804155370125222 0.0375934523774637
 0.0514341340258008 0.0793150939494160 0.1592799168373751
 0.2206188718527961 0.0785751956589644 0.2806163845579117
 0.1336711498039353 0.2446063540581115 0.0371031344567352
 0.2999516255116907 0.2466409106293521 0.1594904663020494
 0.4686807609499929 0.2457314930342376 0.2825058297333840
 0.8846938403941914 0.0798887855049141 0.0374453128899131
 0.5529441252612629 0.0811297257511254 0.1603223292897608
 0.7204184420443684 0.0796790404119196 0.2808309699707994
 0.6340210124938878 0.2466706464091623 0.0374084626227032
 0.7995729786353013 0.2466357202802931 0.1591497226662741
 0.9680442916912232 0.2439675063748789 0.2803004414679904
 0.3841692591881957 0.4125998655396007 0.0378389368481360
 0.0511233970815404 0.4131138366809393 0.1589475141437457

0.2119991383143091 0.4090678252805371 0.2809800163149687
 0.1334994155607242 0.5799710519021738 0.0378476078460687
 0.3044613459373602 0.5785157024711836 0.1591847418166743
 0.8840018622969743 0.4132141703697985 0.0374749955968846
 0.5497732370372195 0.4173036080779867 0.1582019465387405
 0.7210053288194173 0.4118915940213692 0.2824777810580358
 0.6347943414079210 0.5809628806920183 0.0372016221688358
 0.8012599506303477 0.5810714795824145 0.1591586495529562
 0.9672346084003975 0.5797400493199185 0.2801892079512148
 0.3853605909808575 0.7468157784970451 0.0384165796917431
 0.0525001525414738 0.7453479709031108 0.1588296699636334
 0.2180598568514570 0.7448810425304879 0.2802359408631243
 0.1347235158240959 0.9142527310486258 0.0373401851511615
 0.3019809508515980 0.9132591020078095 0.1595002376195955
 0.4703881282130325 0.9096573705166351 0.2803248685646553
 0.8856137547948405 0.7464615761313934 0.0369860321834024
 0.5521941529515947 0.7435285855458915 0.1606640952376155
 0.7241888987423952 0.7517689312933502 0.2807330464046533
 0.6332830342815873 0.9126867068109343 0.0380318399297141
 0.8014543465366730 0.9134650788013098 0.1580599987193180
 0.9709774922684031 0.9128813755021994 0.2799764854577649
 0.4540999965187672 0.5896086465941324 0.2922054715444222
 0.3693038984902549 0.4029380790041329 0.3684337919778563
 0.6345177881960949 0.5841136174480971 0.3575486163580404
 0.4450054248716239 0.4340093991125083 0.4456465343429556
 0.4477896724583402 0.6026686824238360 0.3966689458977960

(Ru SAC) TS₃₋₄ (Imaginary frequency = 884.47 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Ru H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2140123604662925 0.0778736789421065 0.0003391127746803
 0.3883271576131798 0.0788885177287229 0.1289936829526932
 0.0527847277925194 0.0751420207831480 0.2467213574147674
 0.0504429758792642 0.0755640637553147 0.0672175411706760
 0.2168721808019376 0.0798324623188756 0.1882477648232441
 0.3867849261301788 0.0743808484929393 0.3111519283825845
 0.3032872716130248 0.2395340183135710 0.0649936412318981
 0.4785189617041374 0.2513354305506876 0.1908998511636283
 0.1356309480391920 0.2399391117354691 0.3102074349084246

0.4703593447204035 0.2466029485259094 0.0011545961148528
 0.1385450933048048 0.2443773584535521 0.1239729658145038
 0.3076505645172343 0.2478205689833562 0.2459497916968401
 0.7169261533269596 0.0771671699497099 0.0028838704742825
 0.8833181475425004 0.0787145720148673 0.1251043061642527
 0.5524786990632933 0.0768507343417673 0.2480697786633262
 0.5481372098887082 0.0777861326948519 0.0662527376850112
 0.7188104146982235 0.0766219337047754 0.1893122760469152
 0.8873298167095895 0.0773895521419125 0.3120083261350283
 0.8039382304160876 0.2457331969053782 0.0650596887352241
 0.9709980834221110 0.2428108327844163 0.1865744147347396
 0.6404637379995550 0.2421628014697015 0.3104475441266503
 0.9698551522953642 0.2420459381840377 0.0008222349848838
 0.6385523496522441 0.2417439856076101 0.1238902517241999
 0.8067568246766624 0.2444113295313710 0.2464809367350857
 0.2165395491422486 0.4104208432589073 0.0032131695168839
 0.3825311354051384 0.4046702604513674 0.1255737166878041
 0.0516170394274623 0.4086280406882831 0.2471261991580249
 0.0469066022758802 0.4097467663716469 0.0668392744906114
 0.2150397619997917 0.4111062713064457 0.1876899118831923
 0.3592365986738037 0.3668040353558939 0.3288792962070922
 0.3047445157785138 0.5766338248278946 0.0666344319218173
 0.4700094301726481 0.5782237931779324 0.1798753616729627
 0.1344675875759979 0.5768079535765847 0.3108822114565337
 0.4695369086773988 0.5772789708299887 0.0016721095284768
 0.1367713471106543 0.5773811962570391 0.1237020619227020
 0.3059352530996963 0.5675883872140911 0.2492289409550575
 0.7149873098681800 0.4105222758201790 0.0018074588847368
 0.8805634494732664 0.4113312818706706 0.1272502182035562
 0.5430760089415987 0.4305081006182281 0.2630217527394977
 0.5498198719873504 0.4124883528355643 0.0683735939116823
 0.7089050789810641 0.4068045443150222 0.1916477585723459
 0.8884097133641272 0.4097892126556121 0.3111465973173139
 0.8051242013722224 0.5771445410472522 0.0639351818835552
 0.9719629488931162 0.5765831694947016 0.1876879691363215
 0.6912803261964557 0.5794099800053706 0.3277358897937072
 0.9716050632444607 0.5776172891238780 0.0005255454546037
 0.6438740800559631 0.5770613711065207 0.1248297112263230
 0.8032748018687802 0.5775016335704262 0.2448228953398427
 0.2183924270349759 0.7439160425283743 0.0031421591975350
 0.3830541181589207 0.7495405720590453 0.1249774454812050
 0.0534633361424440 0.7452369822664143 0.2459465503411281
 0.0498183291816118 0.7459570114804769 0.0660725069058239
 0.2203886548331209 0.7391403143001588 0.1888034235604320
 0.3779001253528452 0.7514737708611856 0.3109443538502146
 0.3034052202597257 0.9166022744110458 0.0650090733445492
 0.4746671096261486 0.9060604304474231 0.1892779644591650
 0.1399332296944703 0.9102026009565369 0.3108336792214920
 0.4706429704757721 0.9086822678827189 0.0014448998976783

0.1403649397074479 0.9086934893150002 0.1253961852465898
 0.3046844459449150 0.9124052887860985 0.2448507118349112
 0.7159686985884565 0.7443422510755847 0.0017603879064508
 0.8855457296552155 0.7415603532015441 0.1255803510773668
 0.5601804260762429 0.7362307950238830 0.2515601378413012
 0.5511743992890018 0.7423872871307181 0.0680236240986914
 0.7191051158925288 0.7481191705195354 0.1878669400864908
 0.8918134996725631 0.7445395237909149 0.3110994869323691
 0.8042385761053040 0.9088640316282097 0.0654917794061744
 0.9705931350517759 0.9107317713141972 0.1856870344295247
 0.6421934220246128 0.9132242660694999 0.3112751943999650
 0.9693485758784747 0.9118665311159390 0.0004677799380280
 0.6379190214996664 0.9138687379530875 0.1242559439033089
 0.8086768720769689 0.9109407975394165 0.2465731260296044
 0.4931904809221095 0.5569890032668704 0.3682097915633619
 0.5043536414353820 0.6627997184910791 0.4027157167418172
 0.3872941312477405 0.0780190992967456 0.0350797758257948
 0.0530708666564108 0.0770302390049727 0.1563360465718645
 0.2219626248940599 0.0764412877149595 0.2777804939441826
 0.1353122114214866 0.2423235053668632 0.0343126972690552
 0.3016184483163039 0.2443011594761859 0.1568566280759733
 0.4720241230412959 0.2416799392760834 0.2792122450889676
 0.8862599789449617 0.0772547901802934 0.0346549413844591
 0.5546798897879948 0.0781264589886020 0.1572662790920834
 0.7225153254362788 0.0765292474616238 0.2783273804026933
 0.6354538635892840 0.2442511423467355 0.0350146817016342
 0.8011896480543760 0.2437680566585060 0.1564442137822604
 0.9696921741330309 0.2414335250158502 0.2776413367477623
 0.3860969608890757 0.4104248385673738 0.0355708745089225
 0.0521921707048269 0.4104578358560667 0.1558271609367679
 0.2118980557351069 0.4077491404058901 0.2775661032920748
 0.1354463084856815 0.5775688181413425 0.0351603300305436
 0.3052844525016489 0.5760835900884989 0.1571036588681211
 0.8853689522592013 0.4107245642552316 0.0348168119913721
 0.5510279344820694 0.4152401404987160 0.1566769893764845
 0.7223960560672291 0.4082112002531852 0.2795863188942571
 0.6361366099259921 0.5781007747562260 0.0349477336935411
 0.8029114851742998 0.5784457491079140 0.1566850160470430
 0.9684094932745568 0.5773761519758976 0.2779048742869347
 0.3868956330822557 0.7442119420658450 0.0359122153377645
 0.0537682759746982 0.7429651476893697 0.1559963935752051
 0.2190936063957551 0.7424954234577575 0.2770290788832737
 0.1362208107450391 0.9117161048222302 0.0345359213379115
 0.3035494853877943 0.9108829475043058 0.1566833086424521
 0.4716432344690032 0.9078731017331928 0.2778099459913535
 0.8871310454683199 0.7437312921188403 0.0343286356185828
 0.5540552000340827 0.7414730243354778 0.1581447796281152
 0.7258350101060046 0.7495850727114067 0.2782351606467966
 0.6349648847055503 0.9099592373817396 0.0352527614622485

0.8033695170494639 0.9107762464290424 0.1553406809878763
 0.9728124909063219 0.9102580683641806 0.2773196351038316
 0.4570661970694027 0.5893586606406374 0.2894802017710483
 0.3858168415039976 0.4155331264029835 0.3595180752963590
 0.6313284893718806 0.5737841506105579 0.3534547455362430
 0.3589643176606944 0.5832317837260736 0.4930720296518768
 0.2859323196241748 0.7055967913811018 0.4551569552522600
 0.4003272875019127 0.7478918124543266 0.4987867993890147
 0.4355873473021471 0.6629694236954490 0.4305774942719244
 0.3582172820723276 0.6765884384316065 0.4758956932925625

(Ru SAC)TS4-5 (Imaginary frequency = 359.16 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.727600097700017

O Zr Ru H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2138617547567886 0.0780484078788345 0.9988405746239808
 0.3886640734040198 0.0801992861540013 0.1277336043047628
 0.0529289133659822 0.0758967632583754 0.2453303939872398
 0.0509673852374927 0.0765921121633055 0.0660225085670992
 0.2170578365156370 0.0792532574216215 0.1867770110826600
 0.3869208128730107 0.0746474089986845 0.3095117039389595
 0.3024412431917157 0.2397779379099492 0.0634844894283954
 0.4789845263786294 0.2534194970664117 0.1899073743609709
 0.1356914883383628 0.2403947443121179 0.3089380781344415
 0.4700176846531362 0.2472678121737698 -0.0001334967918207
 0.1385823759482717 0.2454100754841162 0.1232050080021454
 0.3070771964604840 0.2471803920256477 0.2441837096622695
 0.7172072146941605 0.0780895847944556 0.0015056546264509
 0.8835780875097191 0.0792206657472910 0.1236611266616705
 0.5532177005557322 0.0778498632454673 0.2465427554868459
 0.5482080425172720 0.0783505005853594 0.0646881367317478
 0.7192594978806047 0.0778614365288574 0.1877479808410376
 0.8874103017578250 0.0782266217025814 0.3105790169826362
 0.8038665930761224 0.2467042084577003 0.0638781958833119
 0.9705435456709807 0.2433826407918324 0.1853028012335305
 0.6405134635887543 0.2424448447726557 0.3091826019456729
 0.9696172150101835 0.2425814952889526 -0.0004578839638118
 0.6382886583831082 0.2424552585688010 0.1222406854581324
 0.8063710006612611 0.2458357817257221 0.2453034511500116
 0.2166256521758632 0.4112663485362058 0.0018043320058467

0.3824608135408080 0.4044615505299253 0.1237463987371613
 0.0523019848017954 0.4089869870566542 0.2458036094991392
 0.0470885044931287 0.4099266063480454 0.0656150610772386
 0.2159138545411093 0.4128634072806484 0.1866629094326701
 0.3584702655701489 0.3630505771447336 0.3276185931288522
 0.3042603088198332 0.5772648227788058 0.0655871392782480
 0.4702724739620422 0.5779429384760496 0.1778383426376211
 0.1346427238503143 0.5771246113820192 0.3095303076885095
 0.4688339867838112 0.5781818134416981 0.0003426126986998
 0.1361765855698742 0.5779123546105710 0.1225926282019181
 0.3078651360463904 0.5689174775582543 0.2487620763335032
 0.7152433583401163 0.4111933045354079 0.0003040621079027
 0.8807119744590803 0.4124909775782123 0.1260540826011324
 0.5431687180417519 0.4325037853908724 0.2638976515436323
 0.5499922655782775 0.4134553652051917 0.0665991606365104
 0.7079609652474889 0.4076070195617582 0.1902789691599568
 0.8886045280079156 0.4111095418878988 0.3098745713324365
 0.8050367915623349 0.5778537500556864 0.0625436801911171
 0.9715637790675284 0.5773486753011349 0.1867520579738793
 0.6900580150939220 0.5816508375240381 0.3273376239624438
 0.9715864267019901 0.5780023498627906 0.9992726092546181
 0.6440556450250660 0.5780632245052741 0.1231640825343258
 0.8024837374987631 0.5780459453245652 0.2436342078108992
 0.2185199110561628 0.7446236985007508 0.0019303314993609
 0.3832245941512410 0.7502574449329671 0.1236530029084814
 0.0541409669319604 0.7458869442521693 0.2448355248303430
 0.0497403380107847 0.7463610945812946 0.0647388597395536
 0.2207643775698902 0.7389518480477670 0.1876387981249875
 0.3804657958181866 0.7537968719138440 0.3103213060312106
 0.3031928720509610 0.9175674010955249 0.0640187085177190
 0.4743948637072095 0.9071337447008271 0.1877458555275680
 0.1397950975764780 0.9107646865230696 0.3096368617618850
 0.4700757267710137 0.9092679858472511 0.0001398918936636
 0.1399831205066456 0.9086573757313554 0.1242675120156229
 0.3046670516369180 0.9116426089430273 0.2437518609530822
 0.7159263072853462 0.7450199712987137 0.0002554867337197
 0.8854863622580963 0.7421775083018878 0.1243422042973117
 0.5590499771937919 0.7366218004285552 0.2499056087680109
 0.5512721650178843 0.7432084517787090 0.0665026150606772
 0.7186517552126919 0.7490162079800592 0.1865585870961404
 0.8913872370940203 0.7452107869325834 0.3095542930428131
 0.8038131727091714 0.9093680243973882 0.0642100538011126
 0.9702398448356380 0.9111421558684329 0.1846037940098469
 0.6417176831858619 0.9130882732650850 0.3102661793294014
 0.9693023541318450 0.9127506269011234 0.9993859255466724
 0.6376873610822636 0.9148418701346137 0.1229858915580765
 0.8080878090330148 0.9118401921589814 0.2452830103888732
 0.4968058364816486 0.5375545999602956 0.3661465444709850
 0.4569705163618846 0.6204817892720945 0.4145886275994000

0.3870747485690345 0.0785925442702984 0.0337536254423610
 0.0530438540765262 0.0774850963422422 0.1551689072654947
 0.2219387629022073 0.0766830682715392 0.2765270064320925
 0.1353182539472963 0.2428487766361714 0.0331586281651648
 0.3015638732858693 0.2448813501390790 0.1556599884722651
 0.4716915954827444 0.2439684489734008 0.2781708105174302
 0.8862678165974953 0.0780969804038460 0.0333876051377561
 0.5546844225098556 0.0792482468031490 0.1559558353905559
 0.7225168988061444 0.0777420804036848 0.2768406394881544
 0.6355513965683670 0.2448266215451769 0.0334708701434735
 0.8012521546990748 0.2447473621973542 0.1551769573255516
 0.9698893694859350 0.2425554294010843 0.2763497626668128
 0.3853816748155718 0.4111002384742696 0.0340419920847547
 0.0523882946481250 0.4112203399540725 0.1548595290326060
 0.2136024458759695 0.4082539798865471 0.2767548121427269
 0.1352760272928250 0.5781020591282363 0.0340670520543509
 0.3056644201256161 0.5763850612972773 0.1561081091157130
 0.8854950679926824 0.4114124082909629 0.0335426609042810
 0.5510392248858191 0.4157478694355595 0.1541902847888230
 0.7212405075709650 0.4096490335028584 0.2783771588573189
 0.6363335695520506 0.5790905386129692 0.0333863261946825
 0.8026573233586224 0.5792380189280056 0.1554302401143511
 0.9686568387171590 0.5775103806573143 0.2766406175141792
 0.3865492343877946 0.7447448465205714 0.0346081451906353
 0.0537970040190030 0.7434221399453176 0.1548700024591113
 0.2195190449247745 0.7420559248621141 0.2759629895035214
 0.1362390237790252 0.9123723205049132 0.0333381306391307
 0.3035530448565247 0.9114141190450200 0.1554843317151962
 0.4719614967635937 0.9101654136700490 0.2761427903636645
 0.8870476323560947 0.7444129679106032 0.0330970916359176
 0.5536230891217263 0.7420199679179550 0.1565889279845839
 0.7257050888626353 0.7500302671519585 0.2767135118899315
 0.6347858702058357 0.9107554807528170 0.0339672512813517
 0.8032069955293946 0.9115900345034840 0.1540146113763810
 0.9729040778491721 0.9110086608757597 0.2759867142583946
 0.4593834589895228 0.5940858119607845 0.2901104772058062
 0.3930712290512716 0.4173868307424101 0.3547032100698568
 0.6260753853071661 0.5718558593612290 0.3508434904092088
 0.3854907810587492 0.6064064785201509 0.5139348002338795
 0.3088712136690127 0.7164805170045047 0.4699964029095746
 0.4370534039018020 0.7673754023033028 0.5011732731359672
 0.5263455535556123 0.6458311672168910 0.4286602906023481
 0.3807480478540149 0.6936310596647960 0.4920205285249736

(Ru SAC) TS12-5 (Imaginary frequency = 380.70 cm ⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Ru H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2140523103537813 0.0759654224101848 -0.0000077333269759
0.3849198833807206 0.0748533116260742 0.1259528555603686
0.0516237342277199 0.0737430755184839 0.2456363525638643
0.0490587520877323 0.0743754935426630 0.0656908830070868
0.2168650191129434 0.0779571494195655 0.1878495028493308
0.3843480209143465 0.0727477460855867 0.3104146179343210
0.3002159993653475 0.2393516196620722 0.0649264524478645
0.4711418203417399 0.2422087080065997 0.1882562554741324
0.1338461439583261 0.2386665993396990 0.3100244694311557
0.4675559509912240 0.2437103316072563 0.0012287320722993
0.1353818470371703 0.2420396263429090 0.1239007214258433
0.3053919073726039 0.2474658413389004 0.2462066637459049
0.7154368939568385 0.0751127453634484 0.0019678924804455
0.8834838161557932 0.0758762539108799 0.1243555227387830
0.5525404636356480 0.0748985087877189 0.2476900205091148
0.5476905578177192 0.0754622974851884 0.0657036805381214
0.7173127281166207 0.0740658832341250 0.1880977608052124
0.8870305915262062 0.0752130161817573 0.3118013071570060
0.8009184553082968 0.2429856044249085 0.0651611696157472
0.9680982020747956 0.2416006727021864 0.1865407130511413
0.6394630019352397 0.2383953911501142 0.3123911032364921
0.9664657103147470 0.2408591047810171 0.0003445940364214
0.6356863799603590 0.2405091667509899 0.1243331066875741
0.8038952887113768 0.2402123942128455 0.2463290281789359
0.2157255873991362 0.4092087244313801 0.0021225541328766
0.3825589605758857 0.4040782124973386 0.1254134514853768
0.0510850227288255 0.4074693611116933 0.2462259302825210
0.0473955907229609 0.4074557811616673 0.0654810961010234
0.2150454971667129 0.4093487268015788 0.1870703289543837
0.3648269746736261 0.3720250094500176 0.3260616991629650
0.3015382080945457 0.5749896295456419 0.0668427715866699
0.4667798106460446 0.5760486508396331 0.1815497875272544
0.1292448426909824 0.5749308463264727 0.3124973203182016
0.4663198167386681 0.5748327688215168 0.0013345038583753
0.1333738061092345 0.5750481675218750 0.1236438720218550
0.2969616171963614 0.5720829314245036 0.2499704661898405
0.7140870670661094 0.4081215872647896 0.0012760424839941
0.8828123774702095 0.4095252749640846 0.1252306876828544
0.5517456718612003 0.4110409749694439 0.2522971641037547

0.5489658584211079 0.4102007188905120 0.0675889038017104
 0.7157718350237481 0.4055547022837154 0.1885243216579242
 0.8876578946634504 0.4067481428143652 0.3104538136219855
 0.8009718538543495 0.5749150890536655 0.0643474102717729
 0.9687463222841896 0.5754636275036916 0.1879209598603533
 0.6795072400944169 0.5742372613782764 0.3256228734492193
 0.9679423448405152 0.5756867678740930 0.0006968397282806
 0.6394399208259568 0.5749711824989779 0.1256857306547537
 0.7999208572081805 0.5754048301721452 0.2454771011583468
 0.2161609950936486 0.7406838102495930 0.0018075262038322
 0.3825559905532707 0.7468900369215311 0.1246604248832579
 0.0524404296710477 0.7439701962393699 0.2461988343791284
 0.0488140844052265 0.7440371291470986 0.0655102695804280
 0.2171386453349627 0.7389913319295700 0.1872122832030980
 0.3693251527446600 0.7689816650383616 0.3197375706979551
 0.2997789107078007 0.9114507703111367 0.0641502788224822
 0.4710833746553887 0.9067400601363347 0.1883526271581082
 0.1372069704925875 0.9113101864848606 0.3112070959840342
 0.4679629862706807 0.9069754612427379 0.0012451962158937
 0.1366700557648733 0.9088034749341130 0.1247446235595503
 0.3023707012119470 0.9074415571457897 0.2438249391794080
 0.7147247793371464 0.7423010061075814 0.0013615117780753
 0.8841125430430656 0.7399871968142336 0.1246248472465170
 0.5570549085797920 0.7401350044602896 0.2505068771130904
 0.5492861436622340 0.7396892461589738 0.0670978455881009
 0.7178929211530062 0.7453387988245572 0.1876565380713937
 0.8888472059708318 0.7429441112068816 0.3109406063128159
 0.8014067337958211 0.9076784277050678 0.0653133595594872
 0.9677749193258894 0.9083846945760473 0.1859355196800671
 0.6401201026495112 0.9111888799071083 0.3122958963088054
 0.9663411562704629 0.9092492060979704 1.0000636040959316
 0.6354510641194006 0.9095532245355679 0.1238496300442669
 0.8055060661962156 0.9093295458682819 0.2466350537836676
 0.4840684671699055 0.5645733384615819 0.3732584152268606
 0.4841937754018375 0.6810287010909013 0.4029598022435261
 0.3842353041386791 0.0754950342053704 0.0345813716074385
 0.0510071604248894 0.0753953249365395 0.1554817399061961
 0.2196868702708425 0.0757260360931524 0.2767835849251568
 0.1337411638481616 0.2412237865190719 0.0338968151077151
 0.3008686005499543 0.2423475831709825 0.1561042420655984
 0.4719046309423480 0.2379962882725881 0.2771679120967454
 0.8839641895978094 0.0751804443399701 0.0338290759114922
 0.5524477172056812 0.0745738714136576 0.1556693914885518
 0.7200867744535638 0.0740981535552138 0.2785398748636711
 0.6332128175476632 0.2427800210835661 0.0349457001422085
 0.8003789185349477 0.2412791785200922 0.1553382660335525
 0.9685075255528042 0.2397132084382748 0.2770600561082783
 0.3846474017325310 0.4086953815626060 0.0355181998757519
 0.0505535091629640 0.4087611009656992 0.1550743098908752

0.2102695654633843 0.4080104984357137 0.2768801250421055
 0.1339521988113563 0.5753696207911251 0.0346067230794592
 0.3027696327920054 0.5748585480014126 0.1570480265454258
 0.8836356068903005 0.4086790815570162 0.0342692995363009
 0.5501760490979146 0.4112601474253815 0.1585088681417501
 0.7217059097085678 0.4030236428778313 0.2775665234142517
 0.6336916142087538 0.5749803325294456 0.0353112384672884
 0.8012657001634417 0.5755121892608073 0.1562481534510262
 0.9667472244495692 0.5756579163905989 0.2780110148508393
 0.3845468228210449 0.7416061238499105 0.0352385020258285
 0.0513624985491244 0.7414918985996792 0.1554384049601512
 0.2157297222620340 0.7424621664664367 0.2767372216032243
 0.1339398715621159 0.9092790746247006 0.0338775987677421
 0.3012000876399138 0.9086142954349283 0.1555519415719430
 0.4686854122587230 0.9076742422652497 0.2775774937031409
 0.8842810081255613 0.7417173259535130 0.0340941337925735
 0.5511634315742884 0.7396963376871224 0.1577233168368111
 0.7230133870705229 0.7475214495233853 0.2775789187300253
 0.6333597181064317 0.9076069380317744 0.0346332928701587
 0.8012806292983288 0.9086620543348318 0.1549909097469453
 0.9702192089880499 0.9094934197657725 0.2770152965711332
 0.4606284714935920 0.5834534300798894 0.2839678669248795
 0.3883730764340713 0.4200828695109380 0.3576639735151865
 0.6191254817517742 0.5708318407619728 0.3514442113878757
 0.2968791075132083 0.7047343144045172 0.4175855433558652
 0.3096968609116742 0.8616813396982850 0.3878833271242494
 0.3950510855522014 0.8182340273428728 0.4443797923269173
 0.4830252863252139 0.6501572781974868 0.4404324634222970
 0.3455713830316644 0.7867190156173262 0.4107315237759486

(Ru SAC) TS4-13 (Imaginary frequency = 380.01 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Ru H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2117789024480724 0.0767396241840169 0.9997011352781806
 0.3871769574257928 0.0805028680261588 0.1292484564818916
 0.0503433752548813 0.0760611445598698 0.2459267690646610
 0.0482995220435805 0.0759581247113640 0.0667405477904336
 0.2149597795726492 0.0801320014502679 0.1877742224523694
 0.3841035732082012 0.0760525497766815 0.3113689828009823

0.3008107325975284 0.2385852003282687 0.0639566187669086
 0.4797382635218773 0.2549069337315782 0.1912691600209921
 0.1337234259365933 0.2409369900339585 0.3093033049826891
 0.4679980572595233 0.2453942645014848 0.0001011860246512
 0.1370557690207296 0.2449189275832965 0.1235285874969607
 0.3070500572748267 0.2488658325202933 0.2452295625572222
 0.7148670434392408 0.0771698808004606 0.0018503462653352
 0.8806651359581579 0.0784133131970073 0.1245321123059050
 0.5492136587680316 0.0757585837321016 0.2477052525080461
 0.5461262379500164 0.0768966225749801 0.0655734049705331
 0.7163383039236136 0.0774765266177317 0.1888291496254536
 0.8849019887655722 0.0769944072378756 0.3109727757695174
 0.8023680771054645 0.2455959321036767 0.0640454842429861
 0.9686280804609659 0.2431068226329162 0.1855994400153631
 0.6404771788064549 0.2377648680764175 0.3107512262308214
 0.9681921875087423 0.2419226267405827 -0.0000562020881079
 0.6367044606185683 0.2411628409172455 0.1221140543161710
 0.8047412758788292 0.2456286946784353 0.2456588701200030
 0.2142759434845515 0.4103230916331203 0.0024439658900306
 0.3802696403503231 0.4034231756116814 0.1240168365866081
 0.0488095184836598 0.4089826073122895 0.2461484359891986
 0.0444799132295471 0.4096357077190015 0.0663352801828750
 0.2131622594133807 0.4119076555648685 0.1871470213884801
 0.3539533754600970 0.3710501427301379 0.3289039956887930
 0.3028032884979054 0.5762338213467209 0.0659947760564880
 0.4698258650023468 0.5743070908724199 0.1787561322729680
 0.1321643328095496 0.5767736399736632 0.3101401965759655
 0.4671691229304140 0.5781354529745069 0.0007293532676211
 0.1349322925697020 0.5774208721366029 0.1233115795998258
 0.3050647552394935 0.5682836907537011 0.2489826860124223
 0.7135836653451616 0.4104716925835956 0.0008252158515308
 0.8772911686465433 0.4113378804730869 0.1267825330029920
 0.5421726377706492 0.4294831300181859 0.2711337140542839
 0.5475126513699673 0.4121177118517634 0.0659534448799116
 0.7032013188029984 0.4067672732308302 0.1914995441828421
 0.8867331273208670 0.4096853825296536 0.3110650289324675
 0.8038197726046641 0.5774800091033473 0.0628763575936992
 0.9692178769979882 0.5767981434942143 0.1868159800060917
 0.6915386487445356 0.5797438872270788 0.3288177586723580
 0.9704347659490422 0.5778068445517998 -0.0002331250767866
 0.6425773285273224 0.5763981069849498 0.1228327175254047
 0.8007660648385162 0.5761617623443929 0.2442580940693042
 0.2164560968258247 0.7444588403439347 0.0029383867885188
 0.3811070372800844 0.7482935647283726 0.1249396346444018
 0.0505017766804379 0.7450377704144880 0.2452352095294573
 0.0475282435299060 0.7456791500268308 0.0656880034144915
 0.2183917562583225 0.7395251377047790 0.1884046208565905
 0.3713266077785273 0.7547277168849748 0.3120908279534791
 0.3024370026848564 0.9168140768262624 0.0650911564150391

0.4725498954736734 0.9050795360851172 0.1888136023243150
 0.1370394354812762 0.9111376664319050 0.3097825020761877
 0.4682467477751167 0.9083112778157010 0.0006418722005084
 0.1385347280965740 0.9088196503298871 0.1248293615681474
 0.3031678514514938 0.9132846846639318 0.2444139463021763
 0.7136675945659093 0.7444120698582039 0.0008201936480523
 0.8826303490396793 0.7419965307353297 0.1250952588493019
 0.5568475651517354 0.7365920405642684 0.2519521113336780
 0.5491312692306360 0.7427115816866847 0.0675883717719868
 0.7158110766388418 0.7465438834088159 0.1873455429430529
 0.8891896591301945 0.7444870459992605 0.3104924168777826
 0.8017197275633446 0.9088337696700990 0.0645243531525152
 0.9686440933281678 0.9110342247215487 0.1849201369294620
 0.6414602739698988 0.9135951783067791 0.3110605662352085
 0.9677726160867101 0.9117727825181228 0.0000262560979364
 0.6358643179363412 0.9138240084808827 0.1240699061990905
 0.8062398830139634 0.9096178116301763 0.2452867994791886
 0.4980954934066993 0.5949767124418833 0.3764391874128505
 0.5223168783884705 0.7224102321275235 0.3952986608977507
 0.3856582913814705 0.0777307627692017 0.0343170570135803
 0.0509579008396931 0.0772000959160625 0.1558647754519340
 0.2204526513843749 0.0773554961476848 0.2772824329513360
 0.1330776458701510 0.2418023215522961 0.0337589637652163
 0.2995064367718843 0.2444940805687361 0.1564037900872483
 0.4712570686381256 0.2410245083386535 0.2791100444979976
 0.8843230718154987 0.0772498527368456 0.0340243475539644
 0.5527099953983609 0.0777742692783780 0.1571816832714224
 0.7207790262176564 0.0758564538167865 0.2778656948863676
 0.6339629798961655 0.2429988359177817 0.0334266908118130
 0.7987253158354802 0.2437541570055372 0.1558904989431083
 0.9672744587220896 0.2420389876751240 0.2767915050839292
 0.3826012898069281 0.4100749359485537 0.0342754960822947
 0.0498105011631167 0.4109652764359962 0.1551390184341085
 0.2089574469056469 0.4090054484256237 0.2765244251408864
 0.1333559467149582 0.5778227073917337 0.0348101188326296
 0.3044262207241094 0.5760131035659249 0.1571220957256961
 0.8832513905129512 0.4108123437534530 0.0339655096920916
 0.5496609093406279 0.4140236923843777 0.1523592313946802
 0.7192599196854630 0.4076866365805606 0.2795327039869182
 0.6345219873288798 0.5791310101757106 0.0335433580869002
 0.8004175672513176 0.5783434533489576 0.1560427369684818
 0.9653472954619038 0.5775984495548508 0.2772938682971358
 0.3852339299466315 0.7437897315183845 0.0355247086965133
 0.0518072507206522 0.7429480686624048 0.1555206255910437
 0.2166126123022381 0.7434586157375930 0.2767668935731007
 0.1345809468849304 0.9116802635442239 0.0341669100075314
 0.3019151584534900 0.9110606039637382 0.1563794597147222
 0.4691199296611641 0.9055706645873202 0.2779889851765341
 0.8853683979089092 0.7438769297970883 0.0336798281147413

0.5511582613653575 0.7397929313694518 0.1584948013000018
 0.722263698856656 0.7492074863494963 0.2773791987809757
 0.6324919525302755 0.9097181588406158 0.0349575823891435
 0.8007642121153504 0.9105438361515547 0.1546830832183871
 0.9704659985245285 0.9103022915669969 0.2763049425488099
 0.4504435642431099 0.5853004709028737 0.2956536386388165
 0.3646411509277877 0.3951025562526472 0.3664716664210201
 0.6271655629529005 0.5742260729893582 0.3517452644163267
 0.4464663847051111 0.4096670625896542 0.4437118858183569
 0.3344569509378473 0.5226173224261816 0.4310046388429116
 0.4501440366063880 0.5696837328876300 0.4728099390279978
 0.5922814063102884 0.7099313003573106 0.4119683130079465
 0.4149543443298223 0.5038044833306854 0.4448104257048695

(Ru SAC) TS₁₂₋₁₃ (Imaginary frequency = 430.20 cm ⁻¹)

1.000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017
 O Zr Ru H C
 74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2132112284414582 0.0784480381336789 0.0006835093672946
 0.3835265117484480 0.0775128538906188 0.1263420498109440
 0.0503105191036353 0.0765424946232306 0.2461789400687873
 0.0482789282649211 0.0766755260686933 0.0663147960748254
 0.2153910234997501 0.0798358959642020 0.1882547862798774
 0.3831377209590088 0.0760095837699159 0.3108660855100557
 0.2986348591534700 0.2422209048174113 0.0656433080765596
 0.4694076124096578 0.2441951160175732 0.1887656347384395
 0.1319929226209597 0.2408413658180508 0.3106352791308556
 0.4660478791217492 0.2463021337918354 0.0019852176461529
 0.1336566615332475 0.2443432602825475 0.1246601940751658
 0.3032694000389818 0.2488705515575271 0.2464890020956822
 0.7143695949189365 0.0775318776550211 0.0025780320444157
 0.8823855935486743 0.0783464910955403 0.1247644976799241
 0.5515454710300328 0.0775953651311327 0.2481922816145902
 0.5465894072249187 0.0780364825683566 0.0662190026671089
 0.7162377381839899 0.0768663313009245 0.1885773999061663
 0.8857265443127790 0.0778618156924678 0.3122577903771591
 0.7994156754668295 0.2454812596700026 0.0658230121321221
 0.9662467602960599 0.2438631922779187 0.1872253014085623
 0.6375753245583126 0.2415753342433917 0.3132549909245266

0.9651430743200827 0.2432950964293210 0.0011323993160734
 0.6341353427087189 0.2432762955263475 0.1249123883659631
 0.8020557539231862 0.2432633848764577 0.2470901765901972
 0.2145017169323309 0.4117686678331827 0.0026995690008340
 0.3814481275533614 0.4067393351654904 0.1262303299071869
 0.0492628971409318 0.4098803812987689 0.2469165702461821
 0.0462687822407603 0.4099555389074456 0.0661715127947839
 0.2132447081058232 0.4114620954435501 0.1874790023068741
 0.3613933258094079 0.3724197907021392 0.3265804960451675
 0.2997737641500427 0.5773468981809057 0.0676300569664885
 0.4660271176525602 0.5793334828859797 0.1823469970145036
 0.1286810200945661 0.5776104974112827 0.3125028654272688
 0.4647311112655361 0.5775501940871801 0.0021052280278398
 0.1315243206051638 0.5778108539120298 0.1245850445478439
 0.2984694492369181 0.5720430869473543 0.2503750459897568
 0.7129077219294011 0.4107265913671068 0.0019069573380433
 0.8812497506671185 0.4120917556089507 0.1258346764069318
 0.5485864987410166 0.4131032284890357 0.2527196263622029
 0.5476646298115601 0.4128186183127128 0.0681322265412757
 0.7139804764797760 0.4078432199395633 0.1891786022726941
 0.8853043950941141 0.4099093046215604 0.3110450081113951
 0.7994041341534934 0.5775594029047962 0.0650736879783212
 0.9663289457716280 0.5777234196344568 0.1888108084278082
 0.6737530366046319 0.5780168457668505 0.3260479913895211
 0.9662637166981559 0.5779966120378414 0.0014369795584840
 0.6379521106714527 0.5774843234164436 0.1262568986344037
 0.7965781905175963 0.5782001849437517 0.2463636857852572
 0.2151029986974467 0.7431858778428896 0.0024506317252034
 0.3811426652223557 0.7492185260900900 0.1252915917670619
 0.0508059477414074 0.7459756976964674 0.2466601546946970
 0.0476084498866660 0.7464084551171650 0.0660134685726438
 0.2163139338953479 0.7408871787586256 0.1883097354630329
 0.3681459872876943 0.7704913226420674 0.3194575883413865
 0.2982270427011058 0.9139376642870106 0.0649987682600556
 0.4690585782912289 0.9099675850993854 0.1886642745910805
 0.1350597577035158 0.9130273021297760 0.3112864670573877
 0.4664072821594371 0.9094468940570614 0.0020282035895800
 0.1350796033644415 0.9104578810978738 0.1255949495050235
 0.3010778044802798 0.9104314278631936 0.2446918781355212
 0.7133577841560671 0.7448081030426501 0.0019266979575780
 0.8831051769775193 0.7424181307277177 0.1252317460558699
 0.5564721668274211 0.7464606503374333 0.2512520920548167
 0.5480968282257291 0.7423957280253359 0.0677780479816604
 0.7168103091643037 0.7481399880445772 0.1880478856740843
 0.8873464042199157 0.7453809186973369 0.3113911442645971
 0.7998858368559759 0.9099611817589152 0.0659530630855584
 0.9662206430289442 0.9110205348146191 0.1867102558065968
 0.6395565339781746 0.9151376084696565 0.3136005887797970
 0.9649371580609688 0.9118007264283835 0.0007844966582994

0.6339897376723579 0.9123572211206690 0.1245062213745688
 0.8039075896841620 0.9121834194705642 0.2472075631332113
 0.4441729031909660 0.5881353176486992 0.3746751876371816
 0.5322020072661372 0.5667443582459299 0.4122995679186275
 0.3827383305464063 0.0780755264356824 0.0352084195846751
 0.0497193449388759 0.0777374773760952 0.1560797721958006
 0.2179677379812026 0.0777120561563969 0.2774990354764981
 0.1326171088018566 0.2437566712119660 0.0346062405653389
 0.2993693253141249 0.2445430931722183 0.1566911891295298
 0.4696649925547122 0.2406227341715644 0.2777678275853134
 0.8827420946169887 0.0776501199232304 0.0343995739216570
 0.5511093353153844 0.0775066759694976 0.1561071029638025
 0.7187613249766649 0.0768839275349088 0.2793328699738956
 0.6318981924773368 0.2454371949036518 0.0355237352180246
 0.7989245327621773 0.2436886779142064 0.1558895112179872
 0.9670895063655380 0.2422491140927679 0.2777025124837150
 0.3831816869823253 0.4113938593813068 0.0361539386531349
 0.0489480682815508 0.4112082941890334 0.1557716140924719
 0.2092622595724012 0.4099579129922019 0.2773738090302331
 0.1327399279438290 0.5778370522385332 0.0354192611533816
 0.3017383464058868 0.5771269108306341 0.1580310119099588
 0.8822212837163864 0.4112491524492338 0.0349464563397429
 0.5485001068689308 0.4138013337969964 0.1591284923822413
 0.7195792514397570 0.4052015017781052 0.2779790199506408
 0.6323965472592266 0.5775720458461765 0.0359312480328297
 0.7994648625878256 0.5781488606797055 0.1568832145764426
 0.9649443000876805 0.5779996062307503 0.2784394029484696
 0.3830010180586621 0.7440383980484242 0.0359143658291313
 0.0498431540192432 0.7437927586557209 0.1562175856152378
 0.2146086584529705 0.7438386495572300 0.2776512932024354
 0.1327545354927012 0.9115597275111453 0.0346078918715384
 0.2998599136625075 0.9110679823714708 0.1562793970290616
 0.4668710734720898 0.9118429634522776 0.2778187697074107
 0.8829689006557893 0.7440871158653537 0.0347118506470965
 0.5498647290025352 0.7426480844659079 0.1581440576178584
 0.7221594808542794 0.7517391100671290 0.2780316577090642
 0.6320561209140325 0.9101613255886956 0.0352035847346285
 0.7999659203009069 0.9113844398712474 0.1554680370157526
 0.9694607084884385 0.9119893382278287 0.2775740531705275
 0.4629816179032041 0.5892926958491042 0.2848568676250635
 0.3851325266682541 0.4326043899072591 0.3541096079682089
 0.6362298061276853 0.5739202931975873 0.3609558905017877
 0.3025628784492588 0.6787895678453629 0.4165290077627774
 0.3407422015134681 0.8364901535166642 0.3970736616465608
 0.4371522505777646 0.7367599767417259 0.4317923403436283
 0.5066238302792412 0.4969985935194846 0.4341375305965594
 0.3666026103743178 0.7427084861546102 0.4063972182403491

(Ru SAC) TS7-8 (Imaginary frequency = 1209.65 cm ⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Ru H C
73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2115628577409420 0.0788023376136708 0.0009427392561677
0.3848227164003383 0.0795338765669002 0.1285699255609179
0.0499749106059602 0.0755847340386347 0.2468946638992243
0.0473070680361373 0.0757320205250945 0.0671368285401093
0.2135005947113703 0.0790247888408494 0.1879045315103530
0.3842730257024241 0.0745812622164088 0.3110373464538563
0.2992291726351585 0.2415252969800196 0.0658237258149967
0.4729406271378307 0.2506817191431127 0.1913118109647348
0.1312769849070318 0.2396705945643294 0.3110550195375053
0.4662378383682649 0.2474570069042743 0.0019619546058415
0.1338144643382594 0.2444137458433299 0.1244514150343597
0.3018756035689367 0.2457568363651692 0.2459639352389583
0.7137677526524038 0.0778143923834431 0.0032124576227634
0.8806457014738880 0.0793222169488891 0.1251884807145230
0.5506163806563161 0.0772332896149736 0.2478902987118666
0.5454326227355931 0.0788736813235750 0.0665200140757579
0.7162739875022178 0.0774631526187483 0.1893224145633227
0.8845475047488780 0.0779461059206165 0.3123852615185163
0.7992217230164762 0.2462541484976614 0.0659190185684170
0.9667218634784369 0.2431200598061740 0.1873786441817528
0.6352418856653620 0.2444229065521198 0.3106196401255887
0.9653587975732829 0.2430694485447179 0.0016123079481289
0.6340408911822997 0.2435969483586599 0.1250600999101140
0.8026122286886243 0.2449766457607513 0.2474560211073828
0.2128477650575015 0.4109342344509915 0.0033357698422548
0.3801709251446509 0.4067216983520598 0.1265962068280708
0.0484505739398485 0.4090153747386411 0.2476639668896844
0.0440506452748912 0.4106208928036176 0.0671807356524705
0.2115823412548538 0.4104714248697552 0.1877658685825564
0.3570831266720499 0.3632855600824013 0.3280357543200895
0.2996974111690326 0.5767438769714696 0.0673521491499435
0.4649091893524988 0.5811478006947212 0.1829707882575063
0.1299330552996311 0.5774521457917067 0.3118691175794253
0.4650692772212504 0.5779993267102610 0.0024165039038261
0.1321718523911108 0.5779904057115750 0.1246926148858635
0.2993395759426355 0.5665145665441967 0.2499151842245049
0.7115433684147515 0.4113583431143275 0.0023011118880053
0.8779973483609891 0.4119804975520631 0.1273693493949472
0.5402346188702180 0.4307811735730604 0.2595851827157505

0.5465065507393425 0.4134415019355033 0.0690386229818660
 0.7076479464945803 0.4079589738022285 0.1918384830013893
 0.8844592692440024 0.4109241057724899 0.3116345390138804
 0.7996811282046246 0.5777049938379544 0.0652100380266311
 0.9671640212462792 0.5770102640414985 0.1886445405756585
 0.6820349558713270 0.5807473633534207 0.3283934980010872
 0.9662813514788101 0.5776894971308514 0.0013467349727360
 0.6380336859495797 0.5778775895835749 0.1263160008585173
 0.7986013434619195 0.5789131177155251 0.2460640974555171
 0.2154922487033183 0.7442943808625183 0.0032919436245695
 0.3802861942378540 0.7491898046446221 0.1249430889580258
 0.0511118967443662 0.7455429204225764 0.2461929104384033
 0.0469777954294226 0.7458938781005344 0.0660072901081100
 0.2177141695354489 0.7400395101180824 0.1890410669098344
 0.3792079909946566 0.7521282240054240 0.3096220805382346
 0.2989434714799843 0.9167262682130046 0.0656732963109121
 0.4694467157669849 0.9076252427852840 0.1891941061716995
 0.1359713435950193 0.9099710407207274 0.3114336150172282
 0.4663708492976475 0.9097044149758001 0.0022334133486308
 0.1356326361944794 0.9085195232677129 0.1257570878319310
 0.3002492844524678 0.9127415591648573 0.2454760323323631
 0.7129538989082280 0.7448318575145764 0.0021004683837082
 0.8831337768736361 0.7420488686183739 0.1256198978281332
 0.5592379682993051 0.7403854102284402 0.2506899681400575
 0.5483250586001260 0.7432030649596846 0.0681303880255909
 0.7171596046705967 0.7489214285285455 0.1877771377706224
 0.8887936344164962 0.7455080224292463 0.3115055671132471
 0.7998538664936179 0.9094617866090634 0.0662164651951626
 0.9663617153642428 0.9110866128023926 0.1865176636084368
 0.6384758073530744 0.9142539944439005 0.3124499843198731
 0.9647774695208516 0.9118825957269688 0.0010242417761712
 0.6336990255710069 0.9145924814287881 0.1249136456536942
 0.8045191986702845 0.9122515487018968 0.2473444470049660
 0.4777852394904977 0.5540212700475885 0.3620073524813733
 0.3832451194066476 0.0788128895272627 0.0356316653719727
 0.0493374853921607 0.0772875899432201 0.1564215960513299
 0.2175779032327291 0.0763534716453566 0.2778566680370299
 0.1316963087445166 0.2432612225575690 0.0347737263659298
 0.2978347210584762 0.2447111715716226 0.1571528762761315
 0.4671838993469413 0.2413784052161572 0.2796844299740914
 0.8821592384064605 0.0777841928094454 0.0349751526173871
 0.5510756034102310 0.0794343219904994 0.1573030531440697
 0.7187633172459135 0.0774865428878992 0.2786898400665825
 0.6315575107216240 0.2457181507579619 0.0358573991127762
 0.7978233623190025 0.2445642334379066 0.1569049847689145
 0.9664874393736472 0.2417662155515633 0.2782326672781892
 0.3827613593877084 0.4113511808550859 0.0363034218840888
 0.0483740963163509 0.4107250047121368 0.1564953489847399
 0.2092376728766755 0.4070950649963708 0.2784662461568705

0.1319306437392625 0.5776103655887238 0.0357363420487575
 0.3008195267756502 0.5763122150645481 0.1578758032308654
 0.8814747526984086 0.4114571404389925 0.0354587923635386
 0.5470438856140643 0.4165392344081229 0.1589435848356972
 0.7194581162596331 0.4092720855307491 0.2801139771701300
 0.6322632543440602 0.5783853802008336 0.0358132962217519
 0.7991042263476258 0.5790535982653532 0.1573165571053764
 0.9657908575492553 0.5778346329899969 0.2786221633440128
 0.3828480309625524 0.7446724919736245 0.0361865881622137
 0.0496364469882329 0.7434337967550947 0.1563180775365628
 0.2158749876169832 0.7417587496288524 0.2772090218811009
 0.1325815993179920 0.9118782175500032 0.0349557597733427
 0.2998429189454580 0.9111692529067051 0.1569195632511771
 0.4684825961550366 0.9102886419479075 0.2774123588359171
 0.8830037450462395 0.7441364742789957 0.0346722642206944
 0.5505163496955622 0.7431290589822309 0.1580945435641969
 0.7232691781927669 0.7507936761094947 0.2786551125280193
 0.6316514128500774 0.9107439892858258 0.0355963957907693
 0.8000658232799924 0.9115773373414161 0.1557389992716942
 0.9698061320790358 0.9109795057152098 0.2779056589073465
 0.4593142452811370 0.5922663570648895 0.2855321265287006
 0.3926314882353053 0.4245201132415924 0.3522501118805152
 0.6189381715060377 0.5760173705716933 0.3525459691576983
 0.3805355756685194 0.6171537363425230 0.4668364153903349
 0.3159501874145716 0.7225458168646611 0.4179219679514511
 0.4490458498241279 0.7598234463115060 0.4442869701982984
 0.4387824071787216 0.6183512213772266 0.3922664595243634
 0.3896048784892613 0.6886102118882859 0.4357853164333439

(Ru SAC) TS₈₋₉ (Imaginary frequency = 400.27 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Ru H C

73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2121343661409495 0.0786621635598193 0.0019018059999977
 0.3847064675707266 0.0754956803166854 0.1291800813820986
 0.0502557685408130 0.0741643200970219 0.2479424355720565
 0.0481763187615245 0.0734112743083378 0.0680687714921555
 0.2132631306381704 0.0792637536477532 0.1882926899306488
 0.3844690148070740 0.0734363688789390 0.3118158550133637
 0.2985499822778315 0.2404639223357579 0.0679385396421540

0.4686104061633760 0.2465073345608507 0.1915104547743444
 0.1300769970029399 0.2382937873265455 0.3129648371622094
 0.4645084787079043 0.2461562331113899 0.0032380435719003
 0.1318697089151595 0.2437392420179960 0.1256206578908530
 0.2999937402436200 0.2446608137061592 0.2476933171706741
 0.7140887161805991 0.0758686633915456 0.0042251612601328
 0.8812877583414659 0.0782094801138784 0.1258172037951557
 0.5512834117587453 0.0776231531867960 0.2487398811770392
 0.5458186263602929 0.0785383727811459 0.0674506495036853
 0.7168138707080940 0.0751328441767509 0.1900586838954935
 0.8846743022805476 0.0767061526871726 0.3136292513372729
 0.7969487991420264 0.2448805148890389 0.0674759281550523
 0.9652911454824717 0.2415121804258448 0.1889607986482670
 0.6334964235258285 0.2447119459211801 0.3126372756219293
 0.9640692522781140 0.2413940128736962 0.0034708717734430
 0.6323862312884939 0.2427678676386211 0.1274072021864444
 0.8006294650954362 0.2429054704528496 0.2489528596094989
 0.2134862438369933 0.4093400025675124 0.0044421646420556
 0.3816399239849857 0.4068387548771593 0.1278625328966958
 0.0489397415197365 0.4070158588560923 0.2485507498606172
 0.0446145565973728 0.4098611785193321 0.0677166646817026
 0.2119992771040106 0.4096634243601568 0.1885002679766820
 0.3597184494480893 0.3649437648658556 0.3286484686386044
 0.2981031832652855 0.5755088269009014 0.0689449388474018
 0.4624732706048481 0.5827571693536536 0.1848756371317029
 0.1281926264096264 0.5764796128081042 0.3132234512482229
 0.4637179357225898 0.5766254092153312 0.0039050440030468
 0.1304892404660396 0.5770795453236043 0.1259566433495609
 0.2983255072368506 0.5626693305541762 0.2530249752832960
 0.7120561709391897 0.4103424137711323 0.0032255676398598
 0.8793884685126813 0.4103746153346640 0.1277672357171556
 0.5427887167911493 0.4252466476627748 0.2550509124343631
 0.5472777928963368 0.4115080185268538 0.0697326521850197
 0.7115412321653642 0.4072162922582293 0.1917998425242620
 0.8843050972778812 0.4095333025413437 0.3123025422158146
 0.7977902187580154 0.5765608360148341 0.0670930229770609
 0.9660249440405511 0.5751032832441062 0.1901647663045835
 0.6787082749995700 0.5776280523614260 0.3293700077787938
 0.9643222325044196 0.5765453431853113 0.0027526775619569
 0.6357529513503705 0.5759269554997247 0.1283573834757297
 0.7975782340379710 0.5785338564644257 0.2475438595848760
 0.2153692797811616 0.7421575413567122 0.0038946981196727
 0.3801211649903689 0.7489301009584260 0.1255353826700698
 0.0503679234086153 0.7449628999599132 0.2471685463325629
 0.0470727191890026 0.7449691981846442 0.0667688908416348
 0.2183103239506014 0.7367302949017632 0.1907903450422236
 0.3759707218402187 0.7567485727378227 0.3113437606362067
 0.2967586744958788 0.9150336128496199 0.0664131704488464
 0.4695068982837332 0.9048479748442314 0.1914315364209533

0.1351141242953221 0.9086475545355478 0.3130200407259063
 0.4655884317920791 0.9084800321972311 0.0038326013011506
 0.1349061159259772 0.9060917147465205 0.1276561063935514
 0.2978626866228095 0.9131808572231018 0.2458034140166831
 0.7129015638195330 0.7436529497204989 0.0032017051164514
 0.8837314615842642 0.7404566118879158 0.1267803105602957
 0.5614011818974473 0.7368549640932680 0.2533382715651828
 0.5485235480495064 0.7414819178586257 0.0691861407056148
 0.7169377352784130 0.7482627699417247 0.1886574827574417
 0.8887957796067939 0.7437496914672236 0.3132348892738576
 0.7987528433354564 0.9077792594010147 0.0679310518434452
 0.9650275149109810 0.9104067340849228 0.1878767696385618
 0.6369656389011713 0.9137727576430825 0.3138111754893245
 0.9630450050781536 0.9106710648242043 0.0022136571692945
 0.6321635105294584 0.9132334017506680 0.1259700117700870
 0.8037388451737953 0.9106337650398010 0.2491697708188240
 0.4698827183145753 0.5696059521467408 0.3597539394483061
 0.3823021198328299 0.0774383437188261 0.0368196088541008
 0.0489474166226192 0.0760676937248348 0.1574465468456326
 0.2167159362084605 0.0751593612176699 0.2787313179916870
 0.1315751517667130 0.2421813025855260 0.0360950514677189
 0.2979273709588448 0.2434763134700143 0.1582900098591437
 0.4671093200883630 0.2412219969247366 0.2801078231793482
 0.8813980620669615 0.0760758144095035 0.0360955724406173
 0.5502710158465137 0.0774129658300671 0.1584394094334035
 0.7177720381862426 0.0760169801061808 0.2798505778224474
 0.6308219894666186 0.2449039778060469 0.0374694317882819
 0.7978446211219168 0.2429639987994383 0.1579898809623679
 0.9656078939677940 0.2405664341470393 0.2795651013439214
 0.3827416592692103 0.4100196143205505 0.0376128250154095
 0.0478305687451157 0.4092792704162123 0.1574853036526326
 0.2086377214991156 0.4046277128144601 0.2799760911809218
 0.1312194604524100 0.5762230079955113 0.0367822967570328
 0.2992701192322332 0.5749002345442561 0.1584703398276149
 0.8806260288158901 0.4101142894156364 0.0367156770023592
 0.5471554565149089 0.4140021354218266 0.1614853690284412
 0.7180625349491788 0.4081185815778355 0.2805030371525598
 0.6317157620890747 0.5764482926147825 0.0372799013721261
 0.7986615601047203 0.5773555005062482 0.1585741400786159
 0.9659119474140975 0.5762759445350459 0.2798835429815486
 0.3817435035898023 0.7435879542277664 0.0371670133974683
 0.0488531470262891 0.7419887873519190 0.1577830910425521
 0.2156293379044512 0.7414437382576013 0.2791021629059479
 0.1322232654197826 0.9102108360662259 0.0361163343515686
 0.2991373340254276 0.9095021811296228 0.1581235194664764
 0.4676498958978311 0.9094408521960591 0.2793265804865096
 0.8821364671356161 0.7428946759011541 0.0359280404260051
 0.5505820950953870 0.7427768940459328 0.1586227293900834
 0.7237240659583511 0.7485024957796168 0.2803937762265313

0.6315600893249174 0.9097421993127430 0.0366637157112490
 0.7999432347079811 0.9102348374229696 0.1570582046941767
 0.9693516944571813 0.9098228737599453 0.2793222468573787
 0.4560858152026514 0.5968239454926435 0.2760027958965115
 0.3929506926561111 0.4338883500851076 0.3493854433562906
 0.6108781488072295 0.5781968769985323 0.3499827861749489
 0.5183630654228077 0.4151937179597807 0.4323713243496082
 0.3959512499513917 0.5021097848740610 0.4514944528936931
 0.5290651865576417 0.5771312716144947 0.4586599842273393
 0.4322316838028434 0.6458357728443608 0.3704130351161561
 0.4803397147663296 0.5029414859743849 0.4421636163439873

(Ru SAC) TS11.9 (Imaginary frequency = 475.29 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Ru H C
73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2147553417923538 0.0759219646584474 0.0001122576139502
 0.3853769512367833 0.0744883076894495 0.1260322396523421
 0.0520398565347267 0.0733615288662909 0.2458354943091122
 0.0497642356736052 0.0733701776213889 0.0657823509209999
 0.2169990276876193 0.0763227325091037 0.1877254901234056
 0.3848194389222353 0.0732526182099958 0.3102777361034679
 0.3001603060682043 0.2394324683320223 0.0653755311871777
 0.4707661851216958 0.2420530967418236 0.1886546855252153
 0.1333533238475204 0.2376541810202641 0.3103995546509042
 0.4673395507249258 0.2435157388107717 0.0015534039445871
 0.1348603676745954 0.2413514777418611 0.1242674945465740
 0.3040757912259761 0.2453519021309928 0.2459546623014173
 0.7158452765542579 0.0747343560191553 0.0021258359213961
 0.8839232837515218 0.0758145414750689 0.1243133488901320
 0.5533228093209007 0.0749176185497453 0.2478098889966582
 0.5482740827377633 0.0755712445502246 0.0658600672220883
 0.7178882853255736 0.0740259181531352 0.1881722913063934
 0.8872900225593923 0.0753228012819904 0.3119312743986155
 0.8005509155308557 0.2426611892112769 0.0654755446896556
 0.9675525706741007 0.2407671230916240 0.1870447707455151
 0.6383991702086058 0.2395475554866227 0.3126297466077085
 0.9665504328060759 0.2405832799035030 0.0007532463990473
 0.6353773346981261 0.2408684751556973 0.1248477067962194

0.8031055384714137 0.2406119811743271 0.2468683014114957
 0.2160704285654783 0.4086350618639785 0.0021393475125981
 0.3830721018842813 0.4041251940110762 0.1258646968889643
 0.0508641242910252 0.4067281130073108 0.2465028908591134
 0.0479250033868187 0.4072344461273061 0.0657105085886395
 0.2148355197210506 0.4084236606528382 0.1869442681550249
 0.3630529633504401 0.3694359423249416 0.3258950980360676
 0.3010067172025381 0.5742793944966369 0.0672194752001986
 0.4669522491086883 0.5772685628420315 0.1823435209883998
 0.1296559353014663 0.5747923642244070 0.3120248174168053
 0.4661935016259197 0.5748138536611788 0.0017639211163069
 0.1328035310768597 0.5749162324018589 0.1242025030985959
 0.2985481379228402 0.5688175250835333 0.2500047292327582
 0.7145263837835601 0.4081344820301550 0.0015862311679681
 0.8827728260599729 0.4090467646503410 0.1254487778587368
 0.5503248534436432 0.4118795627086673 0.2524290879759166
 0.5491930598888363 0.4100588081773276 0.0677717635951482
 0.7156826311059872 0.4055647814110706 0.1889596603726230
 0.8868542014776443 0.4071679861397863 0.3106570760375285
 0.8007337712039317 0.5748268456892540 0.0649232001231431
 0.9676196553256574 0.5745525250397135 0.1884309359326214
 0.6767952286612956 0.5764022188966854 0.3266369707428383
 0.9674885945728672 0.5750480777800117 0.0009824156111332
 0.6391052685401288 0.5747467690332356 0.1261200790289998
 0.7982443901087538 0.5758558609966064 0.2463695305001359
 0.2170312348228847 0.7400881195518431 0.0018882976502035
 0.3827824975070059 0.7463965914475056 0.1247284496563894
 0.0523914712924149 0.7431581298219688 0.2460199950123663
 0.0493156377705862 0.7434328033811548 0.0653679726035353
 0.2180445150264639 0.7380349512820501 0.1878287949937981
 0.3713276355946572 0.7656673882343854 0.3191132207998055
 0.2994192248673060 0.9111763796311035 0.0645292518317772
 0.4706300744256886 0.9069200799908542 0.1884910072895266
 0.1367865989654816 0.9095193639290825 0.3110834227631305
 0.4678514283495940 0.9067066357059248 0.0017367930038355
 0.1364557891121923 0.9071952359684753 0.1251881268030515
 0.3027174556166512 0.9068464114687104 0.2445301677394311
 0.7150682381117157 0.7420075247581236 0.0015487260206294
 0.8848453866423429 0.7396367882626140 0.1248167247336891
 0.5590990118763186 0.7435376572101562 0.2510904472912449
 0.5498661331599299 0.7396096132853417 0.0674158846548652
 0.7186922961051180 0.7454903039771580 0.1875129364771838
 0.8894532324886718 0.7429393351975108 0.3111123247406986
 0.8013512294354727 0.9072071491167817 0.0655955499676334
 0.9676042130085820 0.9081488588091756 0.1862920255366003
 0.6410323144966616 0.9124219978832168 0.3134180561923959
 0.9659884346051695 0.9087250744127215 0.0001860040580461
 0.6353423166399904 0.9098154548816133 0.1241553644634056
 0.8055227880452521 0.9099795394817451 0.2468941413192788

0.4525755255605290 0.5813961699052670 0.3743538430010215
 0.3842964703071339 0.0752490634660227 0.0347647055385066
 0.0510956895457549 0.0746747691111416 0.1556321692804305
 0.2195253629275860 0.0745688904102433 0.2770557308229669
 0.1339572414572977 0.2408578643774611 0.0340525651123994
 0.3007211920853431 0.2416803081831549 0.1562369621580804
 0.4708006623060955 0.2386257646644719 0.2775421178615823
 0.8839463468236826 0.0748189966552120 0.0340177697333502
 0.5525588286111824 0.0749118793111578 0.1558804588070793
 0.7200677887618909 0.0744095240774906 0.2788979642351279
 0.6333167994150470 0.2428077507392928 0.0353115469250958
 0.8003931220387049 0.2410816185331126 0.1555979790060192
 0.9685040611673372 0.2393640691728367 0.2774395332356676
 0.3847857070399767 0.4084403869228030 0.0357724947795073
 0.0504460289843148 0.4081252861896716 0.1554842295633331
 0.2108242115953911 0.4064463567500790 0.2771825561476299
 0.1343054869132765 0.5747954016931336 0.0349085626270028
 0.3030486927045224 0.5740902694120815 0.1575288101047451
 0.8836837021791587 0.4085711977480070 0.0345743093516933
 0.5498146901805239 0.4115804447543689 0.1590423352769080
 0.7208080157481133 0.4026960603993215 0.2777019987896024
 0.6339499299387027 0.5747660616128591 0.0356943613075388
 0.8010026135499116 0.5753985955067644 0.1566013378792241
 0.9665822014542779 0.5749991181081074 0.2781034969555717
 0.3844352220689142 0.7411855645827576 0.0354485978897407
 0.0512674746895194 0.7407839236987719 0.1556478692731653
 0.2157669537936615 0.7404991873748485 0.2770025710657284
 0.1342379103730435 0.9086191821025458 0.0340873487915455
 0.3014121076240165 0.9079908257701522 0.1558963585059913
 0.4685393844866638 0.9091801048106773 0.2775665917347792
 0.8845031256106899 0.7412952486604439 0.0342223654928971
 0.5513949010620173 0.7399987818238281 0.1578182059012616
 0.7240503701925167 0.7495231618441175 0.2776379056138357
 0.6336392282238976 0.9074771858718894 0.0349189568420529
 0.8015841177524465 0.9086507756284221 0.1550499120470114
 0.9710244452984864 0.9090448455102144 0.2772998824580933
 0.4619380129672006 0.5882883740269972 0.2843134015036010
 0.3888961125520544 0.4307213848829912 0.3527310007596447
 0.6211536993413429 0.5778754752925604 0.3542866236250389
 0.3367677988790200 0.6573249629464445 0.4299288579909519
 0.3057919769447273 0.8011113159277131 0.3947910702167869
 0.4408591681996410 0.7760767569511449 0.4192353497924949
 0.4856818176876604 0.5508140537853229 0.4075140599726247
 0.3666965235639606 0.7344969482055362 0.4059582576427253

(Ru SAC) TS14-15 (Imaginary frequency= 269.60 cm⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Ru H
74 35 1 4

Selective dynamics

Direct

0.2140122803172062 0.0774973712437728 0.0030557393744388
0.3842805576286850 0.0770966980452030 0.1287894493324728
0.0506441183778321 0.0769033348598995 0.2480468429712772
0.0490925220640719 0.0766802865672673 0.0686212864947393
0.2165749709455298 0.0773796939992621 0.1907297961651722
0.3840667152129527 0.0768531233345797 0.3121109652258980
0.2999050631597484 0.2416669700856602 0.0675335205172800
0.4712005486360553 0.2444134764150050 0.1911510774097067
0.1338511622593970 0.2398717211518360 0.3127271088176187
0.4672043286949474 0.2455463546953851 0.0040440801464072
0.1359373366539813 0.2439817852160218 0.1272235591983346
0.3033917412209632 0.2477643028510741 0.2478098693503625
0.7150203563283526 0.0770042141960872 0.0046740659776034
0.8830354880623190 0.0774499332443241 0.1271032900967128
0.5525658582638044 0.0768103587120592 0.2504252585895586
0.5473384523005649 0.0774232581584826 0.0684834456251124
0.7166402421724172 0.0769983778356931 0.1905546673563876
0.8864403636004354 0.0771268966752530 0.3143119675806290
0.8005884338498532 0.2448057345554275 0.0678690283135666
0.9676920789469463 0.2439125999642542 0.1888126596622186
0.6392498308601162 0.2413643487553969 0.3142441783178356
0.9662106568717306 0.2427517110841038 0.0031910217664830
0.6351318407934272 0.2431826445252767 0.1267160130008733
0.8044518123396998 0.2425206399961795 0.2489356309222472
0.2152201864898444 0.4113598067408830 0.0048952332866321
0.3823433999060839 0.4063644641265682 0.1282708572526445
0.0508235653362519 0.4087333110116091 0.2492390542828744
0.0471461164967906 0.4088043846393177 0.0685692406904082
0.2150802078023872 0.4130424952446674 0.1902130768197949
0.3627327845622972 0.3681626707475516 0.3279554697421858
0.3011086389854611 0.5768590881974518 0.0697211366086918
0.4668614263306381 0.5781355371602359 0.1852070856793659
0.1289112209395853 0.5773596217344306 0.3142388561116860
0.4657902049905331 0.5771086458603492 0.0041308465719823
0.1330755741315741 0.5772506912776620 0.1262580318138262
0.2996066357470184 0.5746146426277576 0.2539146220657500
0.7136753119681032 0.4099887318306443 0.0040647952711339
0.8818473403245903 0.4120115722881152 0.1279758857256610
0.5502615610164767 0.4137202912679783 0.2549315215280359

0.5483807350486742 0.4122690587923188 0.0700888221358298
 0.7145264325106169 0.4071305466384274 0.1915754904563656
 0.8866701499534884 0.4092454993999084 0.3131145958803074
 0.8002616452269606 0.5770837693311179 0.0669912834194477
 0.9685283245853782 0.5769410467126832 0.1905782203159561
 0.6791104924739386 0.5775174165874475 0.3281631106037679
 0.9675041887033160 0.5771245562223299 0.0036599148196856
 0.6385983142904905 0.5768508661099290 0.1282502880332785
 0.7998262103771410 0.5775887394152335 0.2479654619653786
 0.2156408336908413 0.7425777817020958 0.0048145927563752
 0.3820852039449676 0.7481066560931637 0.1278208481322380
 0.0510962455342181 0.7455389150313820 0.2489609755809852
 0.0476316819475002 0.7458116241232489 0.0683519835942406
 0.2160563356406939 0.7400417367162220 0.1906143446645672
 0.3655881020203111 0.7801793768317538 0.3260420514067377
 0.2996562833513252 0.9130203300894664 0.0672743098037785
 0.4709855575242372 0.9095604206265406 0.1909241010619311
 0.1346495610850269 0.9134561617554269 0.3126295012218847
 0.4674250083007365 0.9087730661063560 0.0041489452118313
 0.1363509120909256 0.9097786073715781 0.1275131664700382
 0.3035833593344108 0.9066472655501840 0.2474645725831266
 0.7138442172863293 0.7443717171483826 0.0040576779081718
 0.8827469101956495 0.7418697590416130 0.1277792170357657
 0.5546090592977038 0.7441199379864827 0.2545497006466988
 0.5486606465122819 0.7418022790494803 0.0700595802026669
 0.7157914308802447 0.7472665983428755 0.1907941427026785
 0.8876503713602943 0.7453369855183496 0.3132457031255313
 0.8008659747064186 0.9094496985905494 0.0679800242938455
 0.9675524265480959 0.9102952876515786 0.1886425417475834
 0.6403218953943366 0.9142519377398060 0.3150995089105919
 0.9660576387703941 0.9114263696942757 0.0029928851105865
 0.6351533018869944 0.9115846791808053 0.1265387819655217
 0.8046584156627929 0.9119087693486208 0.2488866960250320
 0.4773819436950788 0.5633302752849403 0.3578538656162777
 0.4064181867615630 0.6493953924903835 0.4098881729727495
 0.3836330116543536 0.0772720582986608 0.0374084313642555
 0.0507106044193506 0.0771019082718425 0.1582690568954348
 0.2189291881556557 0.0769787075124952 0.2797643631486153
 0.1335310022269312 0.243233334890728 0.0368257716741667
 0.3004878171866991 0.2441579187985212 0.1589690749084056
 0.4695401918303403 0.2401349719527843 0.2804463222832112
 0.8837594217531759 0.0770713299000150 0.0366164248944401
 0.5519991350425073 0.0772132800040879 0.1582876720485658
 0.7202122223921492 0.0770251858632278 0.2811830468052534
 0.6328101283080869 0.2445539978797271 0.0373615841949189
 0.8002121372903872 0.2435084528351297 0.1580349456941050
 0.9687959388303256 0.2418636038614679 0.2797309143840394
 0.3840482675355048 0.4106619920785377 0.0381044103735775
 0.0504428100759071 0.4108275248275959 0.1581720100815005

0.2115324680172392 0.4094235299571665 0.2805429561155393
 0.1333044826794492 0.5771464134559778 0.0373423354423750
 0.3016851134996159 0.5768769312101583 0.1598580090419190
 0.8832625149419613 0.4105598809028450 0.0371009661593860
 0.5500968233705805 0.4122429753229255 0.1603577975064496
 0.7223944975100167 0.4051224936594053 0.2808296027410009
 0.6333267229625008 0.5770683324548855 0.0377702349793978
 0.8002620814885759 0.5773422089547751 0.1590954176208612
 0.9662298757455687 0.5772985115503459 0.2805177248944020
 0.3839010916070080 0.7435471905337749 0.0380312809035175
 0.0506504436081201 0.7432327472223434 0.1582006684601964
 0.2126241059542480 0.7439841020146218 0.2804648711327005
 0.1336951583559340 0.9110017572851561 0.0367854028646661
 0.3007533841730776 0.9100913966515023 0.1588666481852457
 0.4693166936046040 0.9139393042788768 0.2803264481618157
 0.8836153782766729 0.7437017626558173 0.0369303380908761
 0.5506846119470197 0.7426398368019917 0.1599650384869875
 0.7232142270718924 0.7501961380739033 0.2806865603684514
 0.6329232855060241 0.9097843445705820 0.0372203807520464
 0.8005640532984017 0.9107569190453546 0.1578271968547043
 0.9693174757831358 0.9120892380335874 0.2796783139962500
 0.4668663291876101 0.5808211170238309 0.2810041035518012
 0.3960303232522762 0.4306061778323382 0.3526314977582246
 0.6153962849094441 0.5752442573233125 0.3522390010476926
 0.4694695123488728 0.6706899982208157 0.4309288703040721
 0.3831600662837076 0.7363363078673544 0.3617692178735364

(Fe SAC) TS₃₋₄ (Imaginary frequency = 708.68 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017
 O Zr Fe H C
 74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2139654656528559 0.0791151066518971 0.0007020889057647
 0.3887403005420380 0.0765481329256931 0.1295255431037834
 0.0534320425058439 0.0751054825634697 0.2476983620754702
 0.0516217088694430 0.0752520828734486 0.0681707267814014
 0.2156537995517306 0.0817190876192642 0.1875984612530758
 0.3874784692669661 0.0739604073861038 0.3114237668207673
 0.3036134275995106 0.2392444943419215 0.0661900057587420
 0.4751233270225469 0.2497606172564370 0.1903196600701541

0.1356071172165780 0.2409942134496032 0.3112017176414071
 0.4698946016644619 0.2477443648995506 0.0018603716290432
 0.1378264179715738 0.2470699030743292 0.1246189790653848
 0.3061419075518697 0.2460230608314492 0.2461007785943770
 0.7176526002574087 0.0771521253640234 0.0037916850789720
 0.8835178953029731 0.0795088642243162 0.1252621957979198
 0.5537305166513302 0.0797258432211480 0.2481266486363269
 0.5482485632779184 0.0791412242279691 0.0665185630669882
 0.7200006239968286 0.0756736509374850 0.1897952627318451
 0.8871626050480750 0.0782601970072386 0.3126806591645876
 0.8028734797155257 0.2470664308025330 0.0658974283041681
 0.9707796638840734 0.2427736961587964 0.1876350349467139
 0.6395720839446281 0.2445923138467052 0.3112112666861978
 0.9696898365009075 0.2419864260497085 0.0020640060127260
 0.6381618017629319 0.2416721957966581 0.1255970840017318
 0.8058940525690488 0.2441818000318080 0.2471952651931804
 0.2172712901054116 0.4105223211407305 0.0041401044274251
 0.3831251298755217 0.4061218238484824 0.1262070235394797
 0.0529327950351899 0.4087413516189197 0.2477620082505377
 0.0472313438134372 0.4112112642417025 0.0670574400523859
 0.2166301451596044 0.4138831217166387 0.1887919926488358
 0.3604218169275410 0.3618710272599872 0.3286843828768778
 0.3037982967611922 0.5774169379920199 0.0675566217349399
 0.4686543212437279 0.5812050913225851 0.1806503050014107
 0.1360791419709289 0.5782581707871040 0.3105314505933567
 0.4691323942891445 0.5772591822020060 0.0027071593453417
 0.1358504928448777 0.5782488547250245 0.1244860818165664
 0.3143468661798486 0.5648556222575773 0.2525981455038921
 0.7149020304155794 0.4116080403594820 0.0023499892851468
 0.8823052784653673 0.4118019145406568 0.1277311603524950
 0.5437139204350373 0.4292558444947246 0.2576673543796325
 0.5507419090475014 0.4124184213689696 0.0695036287129996
 0.7121860425683385 0.4075939469189925 0.1912861128211549
 0.8887395468648863 0.4103551672210635 0.3110747051613700
 0.8044877439700927 0.5773710275975975 0.0651629740373261
 0.9718152324352374 0.5767511327335100 0.1888720808526612
 0.6915312046436106 0.5769299300338581 0.3286418622736538
 0.9704468847983837 0.5786465410900712 0.0011569238107904
 0.6432023744119765 0.5776904090008619 0.1261932256641930
 0.8028238973569227 0.5787921747645464 0.2454767417769265
 0.2183612619360053 0.7440230655573491 0.0034880282513199
 0.3825885398996314 0.7514334730370186 0.1248960989827595
 0.0529950488267552 0.7471925165658911 0.2466229392282290
 0.0495628606336973 0.7466165499389178 0.0666903227695251
 0.2217666602776633 0.7358983946907497 0.1907714548733682
 0.3777384332120277 0.7595076562575187 0.3098265152091802
 0.3020105940131129 0.9174685392076884 0.0650063144476992
 0.4761677419911793 0.9040698642779627 0.1912755682355847
 0.1402429191960240 0.9100695817106018 0.3121980988549957

0.4704873722373333 0.9088577261744764 0.0021971945612968
 0.1404621069970836 0.9068985439684909 0.1267426843261005
 0.3019701110443235 0.9164581874176766 0.2440774442598923
 0.7161114448788604 0.7446804216652196 0.0026273087814395
 0.8854918105956142 0.7415525015573020 0.1268579001571024
 0.5583101884088975 0.7265449535031533 0.2544922020256282
 0.5510917563801625 0.7423849240859322 0.0685967257886105
 0.7170246590109460 0.7501369169179799 0.1891707774551818
 0.8914235316090032 0.7439042081547583 0.3121591131598612
 0.8040509772195301 0.9087571006927618 0.0666608339846084
 0.9697207951746789 0.9123452605479120 0.1863853010366247
 0.6398354508654408 0.9121696611167636 0.3105724510559800
 0.9684545183274821 0.9126351782134785 0.0012118840561442
 0.6371218349691620 0.9145589450176449 0.1244750799133925
 0.8086432623865206 0.9106455380894716 0.2480526826194021
 0.4808996658372678 0.5499961591677285 0.3560847309270708
 0.5024422274741003 0.6463364182900513 0.3941671801108312
 0.3871458212494452 0.0782437094388068 0.0355606938333168
 0.0530588270062314 0.0777137838574497 0.1569479555597750
 0.2212450595345851 0.0775750070405678 0.2780832222218484
 0.1355858635189545 0.2431346508755991 0.0350170350642814
 0.3020669576895582 0.2445287715134750 0.1572467862586975
 0.4718734731539445 0.2434779399198778 0.2790673633493043
 0.8859380585064897 0.077451331897423 0.0353921027413791
 0.5545891387655729 0.0780707643981507 0.1579289506927484
 0.7221454766814335 0.0771272015114502 0.2785648294583032
 0.6350503048681984 0.2455955887723567 0.0363405122232108
 0.8017154295319449 0.2440266037821891 0.1569066115134308
 0.9701118749708473 0.2423827148798719 0.2784161391667289
 0.3868806625691529 0.4108233175025950 0.0365167412158853
 0.0526538521308360 0.4111046846624999 0.1568223688374052
 0.2146117395175926 0.4078423122702453 0.2787184117953472
 0.1348956712115019 0.5779106251945318 0.0359157310612249
 0.3048999394248816 0.5762961252276223 0.1572312752718824
 0.8855122041410809 0.4115112802961938 0.0356710365652605
 0.5509283519836344 0.4156353180313685 0.1596510064999771
 0.7217446179782765 0.4079573893617254 0.2795126634724153
 0.6360296038771730 0.5775018662937035 0.0359654532946081
 0.8027537258596457 0.5782811138228022 0.1574950112318880
 0.9690754439744390 0.5776601195319310 0.2783720031605083
 0.3860108202594038 0.7449936157126928 0.0362463951764457
 0.0534228637910435 0.7433298787436530 0.1572379594807236
 0.2204434772565646 0.7446650151323572 0.2786794475281253
 0.1361041174661045 0.9120625067512372 0.0351724713459885
 0.3029798376953740 0.9113628369416725 0.1572996814354341
 0.4699177026843542 0.9102276697447083 0.2792409240903386
 0.8867047723268295 0.7441878556979387 0.0351529382824868
 0.5540495297298281 0.7424880787570224 0.1575237793725524
 0.7258928881081395 0.7484208233472390 0.2793134667702509

0.6354053846312046 0.9107124386632330 0.0357151669263978
 0.8033745431882061 0.9111690467603615 0.1563190801914421
 0.9725656980451601 0.9108483846059847 0.2783496676696355
 0.4588325432274120 0.5990957563661187 0.2799059358288581
 0.3933981320372181 0.4236548963098743 0.3531325501320575
 0.6302465186033750 0.5726576409684857 0.3531351851352804
 0.3599788110588986 0.5779835125406466 0.4871770047803901
 0.2861530542652710 0.7009005031300929 0.4497562445040020
 0.4050640778748750 0.7421582734095030 0.4906474300329144
 0.4350185329911279 0.6515806114774679 0.4213301071181847
 0.3590139204835811 0.6709791840604600 0.4697111599572741

(Fe SAC) TS4-5 (Imaginary frequency = 326.53 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017
 O Zr Fe H C
 74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2154956171259245 0.0805680679077743 1.0009311051551524
 0.3886363643354608 0.0768273026581339 0.1288870159136433
 0.0537131572372918 0.0747159281194871 0.2472983228039016
 0.0516477677595627 0.0743598718248879 0.0672671633154850
 0.2149986291729825 0.0825774333316115 0.1864083643479639
 0.3891867207930129 0.0740909395951422 0.3109323979973241
 0.3041923097959416 0.2419267398314907 0.0666646764554779
 0.4734358881406943 0.2496038745428790 0.1903604771970459
 0.1343405855882501 0.2402324013438637 0.3114804112073947
 0.4693086473902160 0.2481082831363824 0.0016365219929329
 0.1365672778124178 0.2466319317120256 0.1235730930212332
 0.3043504653016569 0.2446037519966399 0.2459940445410234
 0.7175068128119673 0.0771341577769024 0.0032517957034844
 0.8839811182207807 0.0804168272952813 0.1244996428304489
 0.5550666464651166 0.0804234873435472 0.2472491356960018
 0.5488105270102565 0.0805631080087775 0.0664215600427684
 0.7208788745536874 0.0760793342665327 0.1891397193502727
 0.8874484531423263 0.0784521617278396 0.3124138540544061
 0.8014755958438995 0.2468140495031059 0.0656526497062215
 0.9707280244396291 0.2425062992630095 0.1874199495468321
 0.6382197338365065 0.2472288218243444 0.3103635834949000
 0.9691073992866914 0.2426192270499372 0.0021221435001010
 0.6372302353131681 0.2440382217551456 0.1262165649226579
 0.8059629996840749 0.2444748824128186 0.2470692715832610

0.2168059622388572 0.4105277839529943 0.0035375454697049
 0.3849279433827107 0.4094756395274884 0.1271693369995227
 0.0523568536752757 0.4086185645382705 0.2476095586766772
 0.0471665849612593 0.4122937093208721 0.0666379468880856
 0.2152832407887121 0.4117353837401291 0.1878540514308035
 0.3613084355927138 0.3623919522277287 0.3282082454267454
 0.3030530747997657 0.5770494542265238 0.0673157458603921
 0.4662873911125368 0.5863314864082728 0.1847827852475939
 0.1343781427698016 0.5787851930018110 0.3104783633954366
 0.4688128161264744 0.5779692846039175 0.0026149764285484
 0.1357913725266986 0.5786692915291091 0.1243839223023245
 0.3099702331510605 0.5606751894233321 0.2520368183121262
 0.7147827521690925 0.4121624325568635 0.0020641138414758
 0.8821163890058712 0.4113828266851570 0.1270146426424253
 0.5427566774231563 0.4321949764690688 0.2553170153504450
 0.5505253016629309 0.4127474707838480 0.0692117395398325
 0.7135448270986348 0.4087485545152864 0.1912654425494899
 0.8878264431330908 0.4111565296692623 0.3110255005827743
 0.8022028293430888 0.5775461889063402 0.0656977186340575
 0.9710870541779474 0.5762028636475327 0.1882158196431832
 0.6867291671574625 0.5779120964954907 0.3282107208960674
 0.9682223591446445 0.5782996066824515 1.0010554513263619
 0.6397798262452047 0.5775499834476715 0.1271258785070040
 0.8036006531327530 0.5802360681311499 0.2452854372483701
 0.2189517271509762 0.7440244997300194 0.0029644288432489
 0.3829948020482974 0.7505738334851099 0.1245203318826153
 0.052385995789996 0.7467498118011114 0.2455730294795309
 0.0502017975333784 0.7462685139169987 0.0656649445745228
 0.2218908023147503 0.7368458553389471 0.1903542656936624
 0.3818342252575241 0.7535756578246844 0.3008781810770682
 0.3017321755226663 0.9173643689335549 0.0648156691868256
 0.4753352267326025 0.9052064856795665 0.1906257996479565
 0.1397805692106405 0.9082824189844704 0.3117798346405520
 0.4704240321420498 0.9099754240812620 0.0023897827749794
 0.1400793206400173 0.9063502732704567 0.1262279569194169
 0.3006832844557401 0.9192434568023795 0.2437147132715914
 0.7162448775752097 0.7448946991182328 0.0022871321914848
 0.8867688176391615 0.7416249702280623 0.1257840738807566
 0.5639280348400123 0.7295509308746334 0.2531669995819421
 0.5516655177738697 0.7430376962790591 0.0683576916321861
 0.7195743873183879 0.7505505641469131 0.1876700639610269
 0.8922315824999839 0.7441829761872520 0.3123010291240241
 0.8035710368315309 0.9091088850223470 0.0664589516644306
 0.9694387676936216 0.9126441868640208 0.1858557249726486
 0.6400998978067696 0.9142375254806295 0.3110226943484341
 0.9675967755083534 0.9121806295317766 1.0008002235109772
 0.6366466967858109 0.9154729465595605 0.1243857789859724
 0.8086070868268730 0.9112234446846006 0.2477960745724732
 0.4817011308205783 0.5605145633472642 0.3448885517459321

0.4543525537236106 0.6433395930528021 0.3949625759977830
 0.3867809604097940 0.0792265861822444 0.0355643464471750
 0.0528540624054945 0.0777763181027840 0.1561094946112481
 0.2203509846286953 0.0770010207937045 0.2774042715661572
 0.1354318346850795 0.2439011350058192 0.0346610238644082
 0.3016493767886528 0.2451604651365359 0.1569605752289244
 0.4706245014031333 0.2439999663575063 0.2791268565367110
 0.8854242357957778 0.0774197469182987 0.0349039710876446
 0.5546356736628211 0.0796171562684796 0.1573697714019005
 0.7224621010698795 0.0779373834624568 0.2780923842310675
 0.6345143984718684 0.2466932511348510 0.0363410101292671
 0.8015396099932351 0.2445107057912361 0.1566829084246196
 0.9701752585397180 0.2421056550424621 0.2781869342783804
 0.3874448610038431 0.4115815204880029 0.0366271289871946
 0.0520292657080999 0.4107092551370273 0.1563542038483141
 0.2142867242335855 0.4063224330254012 0.2788256274280223
 0.1351430823930115 0.5777078965016071 0.0355806138503494
 0.3035130375085345 0.5762080294707537 0.1574815388226792
 0.8846310336981473 0.4117472827737081 0.0354557321532309
 0.5502826929419230 0.4171071075067434 0.1614409218555484
 0.7226783046456465 0.4099552543159710 0.2794822189248603
 0.6350620568590026 0.5776183510489659 0.0360462421588376
 0.8025739318280634 0.5786392232841788 0.1570835813298625
 0.9696114410782048 0.5777019092585015 0.2780185491491524
 0.3858060829728401 0.7453767521722366 0.0361554761041153
 0.0526572937325307 0.7432114492806575 0.1563381629893792
 0.2191695819745880 0.7425607634657434 0.2774672008822186
 0.1361307180106268 0.9116868736468527 0.0349067339760125
 0.3028874202059255 0.9116152723944424 0.1570075993192973
 0.4724296166856882 0.9118864812550808 0.2777319681927550
 0.8860712503810084 0.7441441588490563 0.0345512213353307
 0.5550038272527699 0.7442078288552272 0.1575635438606215
 0.7271847524011025 0.7482371187672247 0.2788638399782921
 0.6353730093640321 0.9112718474346009 0.0354457560888541
 0.8039826483422687 0.9118237560567949 0.1557090047224432
 0.9726276666515834 0.9106387724150846 0.2780646411019878
 0.4575071911166098 0.6039082210432652 0.2720911602146320
 0.3989075110548159 0.4345216184396273 0.3447956730021463
 0.6105678282175732 0.5719661635662097 0.3401687047117363
 0.4079733881463327 0.5809239641329708 0.4959206830272884
 0.3155382608336610 0.7009573562273961 0.4679359278849174
 0.4505848428477597 0.7477896829487253 0.4921942222009174
 0.5256666941008002 0.6468503233502747 0.4108519639497601
 0.3943720445483702 0.6749765071704272 0.4816523541183098

(Fe SAC) TS12-5 (Imaginary frequency = 389.68 cm⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Fe H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2136744644889234 0.0765022425756242 1.0003872035926140
0.3856436408459417 0.0751766802832640 0.1272832854142692
0.0512177074860265 0.0742728440560725 0.2463289014691112
0.0497265941144835 0.0747602732503902 0.0668213920023126
0.2155024846316070 0.0785931579628068 0.1876270543523784
0.3839922657294625 0.0735661932785555 0.3107779153728791
0.3009748692221340 0.2388740787059465 0.0653306684810458
0.4725022434144344 0.2444580765045734 0.1890606605084804
0.1342610874646323 0.2393219755049764 0.3103174341584968
0.4681694980141543 0.2444656097401025 0.0016642039415014
0.1362516265494725 0.2441984217108871 0.1245025097131880
0.3048494803474162 0.2461525217970685 0.2457456566949276
0.7156791253963726 0.0754805857770573 0.0027224643204532
0.8829976626913671 0.0764255620686777 0.1249929403528823
0.5520516711329959 0.0759859981585210 0.2481298671901915
0.5474037892542228 0.0760268664172711 0.0663083383797441
0.7174105928937633 0.0744662708822172 0.1888177846223967
0.8862854117485781 0.0757022977785806 0.3121715493331256
0.8014106887002648 0.2437292197936267 0.0656209845976451
0.9686541631133903 0.2419258998571800 0.1868259179437147
0.6389964126859690 0.2403293111137645 0.3118918186412987
0.9671598310266399 0.2408109821785377 0.0010011018500447
0.6361358371242666 0.2406293072170514 0.1247986326175802
0.8043511133230679 0.2410848785813854 0.2466719658788954
0.2157461413907983 0.4093755865977129 0.0028923699266139
0.3821664713077773 0.4043050320421802 0.1258031028394489
0.0512643634719518 0.4077779140280270 0.2469083717992539
0.0466526819405024 0.4081017747506780 0.0661694226982715
0.2155604630159259 0.4121718569950202 0.1881855981875890
0.3619587765987680 0.3665794083833039 0.3268657174090811
0.3020777172242469 0.5753416715715933 0.0671673874724278
0.4671300801285211 0.5770434894086437 0.1813661890857897
0.1318144404193674 0.5759296644393141 0.3118513404140312
0.4670290163397262 0.5752488494701397 0.0018822272926109
0.1338841041628377 0.5755655831850277 0.1237983088621721
0.3054652072551698 0.5714887250321846 0.2521957422400884
0.7139220977832194 0.4087716719766797 0.0019594110588475
0.8818205017297093 0.4101350302332581 0.1263324963855330
0.5478009977011541 0.4180556911732887 0.2544520010231613

0.5489211273440933 0.4105727881812835 0.0684235642755417
0.7135536699908054 0.4054853887696045 0.1896957268066120
0.8872668198706121 0.4078513240695689 0.3108391831672002
0.8018906086654387 0.5754517628238033 0.0647280190089952
0.9696205751190735 0.5756742072794372 0.1881985688562025
0.6813914579356907 0.5743560894030173 0.3263333785580005
0.9681948854628122 0.5761191151430695 0.0008981181068486
0.6402892845321770 0.5753426540222621 0.1259160904567078
0.8010106312659016 0.5760658380759784 0.2453928810242600
0.2160161117275623 0.7412082700429512 0.0025856203915666
0.3818157251389248 0.7478107755560356 0.1249821141543065
0.0516609895324574 0.7446568932295777 0.2467109073129085
0.0478475072156084 0.7442876613837777 0.0662061990597910
0.2174860549372383 0.7366877930790924 0.1885647732612473
0.3657154761382262 0.7764445327160926 0.3194132529785617
0.3003740217268183 0.9128715473439076 0.0643751231771183
0.4729320509521836 0.9055171107145444 0.1891715161222735
0.1371956298703008 0.9114450294309301 0.3113591168649308
0.4686451490781014 0.9070531128778117 0.0017235254183591
0.1375125970044279 0.9074130022438436 0.1253997711582903
0.3020046731307594 0.9098367550530397 0.2431068932598474
0.7145035282010925 0.7426250240102782 0.0020518469427784
0.8830401938087054 0.7402404331064665 0.1258374300375818
0.5539805621440258 0.7342143706567076 0.2529203729422037
0.5491981769373468 0.7401427411906917 0.0679638029007556
0.7156267887426563 0.7464143441286492 0.1887444377377223
0.8882898579103765 0.7427627390573455 0.3115257312738748
0.8020725030870938 0.9077276678668739 0.0657737960860985
0.9682097859071771 0.9092497001542174 0.1862086426890969
0.6394654427735773 0.9110803867490747 0.3119120061361934
0.9670186138579722 0.9101598676343500 0.0006690939658736
0.6359653441972898 0.9105721481320797 0.1241813135380517
0.8056859200558117 0.9091690117572898 0.2470142208091913
0.4771670545954442 0.5633617684296023 0.3582551684607620
0.4788279590323841 0.6718227607183297 0.3940530296655172
0.3848413915243556 0.0759793653304548 0.0350908041581233
0.0512548731929092 0.0758414058727821 0.1561947589398243
0.2196494953426592 0.0759508369764200 0.2771316853380137
0.1340098198349846 0.2416453310393305 0.0344810533875240
0.3008188489552037 0.2427783386781694 0.1566527038456357
0.4709093000093926 0.2400327027888198 0.2779617096383707
0.8843971403246774 0.0756154423073988 0.0345995453757561
0.5526248323135019 0.0752116001165948 0.1567100953048546
0.7203254133585271 0.0747093113884734 0.2784917789297346
0.6334294866299019 0.2430842257120360 0.0355732764191642
0.8004936420483186 0.2418804046289613 0.1560540462938300
0.9687552008157970 0.2407050102270104 0.2775711101518837
0.3849535526989024 0.4089276007921346 0.0360121291391963
0.0508880020725845 0.4094105696513017 0.1559412506875783

0.2123159612165970 0.4083686722262694 0.2777419248207082
 0.1334993082217949 0.5757308401265061 0.0351266284172931
 0.3028359372391131 0.5752224262762873 0.1571340891037713
 0.8837757912207909 0.4091839495786889 0.0348909106343509
 0.5502447511356318 0.4117408810242281 0.1588560816663087
 0.7207555023802981 0.4044300321032867 0.2783165811400314
 0.6339884384488433 0.5753966936854739 0.0357602011616964
 0.8009833919922178 0.5759162853846195 0.1568731248135743
 0.9667091168147042 0.5761362408637184 0.2780874609876925
 0.3847316702737951 0.7422213297332770 0.0357208191320207
 0.0514987047824989 0.7416893097485701 0.1562989970946566
 0.2168939149294972 0.7428511651937268 0.2776296813692234
 0.1340715393131745 0.90965556534836954 0.0344463041690101
 0.3011423639977198 0.9090290482625205 0.1560038241397750
 0.4682239340538965 0.9080980112748940 0.2782292408661625
 0.8843803198495138 0.7420825747182023 0.0347476691162257
 0.5515468879088502 0.7404652444540227 0.1579242647152572
 0.7219866311058537 0.7469063301383498 0.2783682054975307
 0.6336017143580488 0.9082371223736246 0.0352119151365828
 0.8013482558130107 0.9090243955329727 0.1557223022239751
 0.9700486596128686 0.9096059886944218 0.2775783022312330
 0.4604207667538748 0.5856721984605741 0.2747107937390189
 0.3920287847054813 0.4293378257293565 0.3517207686198367
 0.6121897066737709 0.5698665250713741 0.3456903764489210
 0.2935460229702795 0.7008008559902144 0.4132341511935594
 0.3172306043946694 0.8615992827468462 0.3903612033335933
 0.3992602683503108 0.7976466666270801 0.4441201310266111
 0.4807128090471532 0.6302805838460003 0.4295367546384258
 0.3485586165662856 0.7782673197045341 0.4091589593983683

(Fe SAC) TS4-13 (Imaginary frequency = 423.90 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Fe H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2114930784665143 0.0777176840988267 1.0003295294958359
 0.3875688277726302 0.0778121016186906 0.1304798459889968
 0.0506597850602285 0.0749130080462415 0.2470861508157723
 0.0489917448070248 0.0751755650642356 0.0678444254774638
 0.2137529153017859 0.0815814057040011 0.1876992413196720
 0.3851263300573912 0.0734099599794802 0.3115647442217573

0.3019573980335856 0.2377794041456844 0.0653199554137051
0.4770132774069492 0.2541194813553069 0.1909708947557617
0.1335521100931491 0.2406012659723212 0.3101853147547091
0.4684063061703417 0.2465689251900570 0.0009387991575756
0.1367298921010071 0.2461911223221420 0.1239447914054118
0.3060908513903577 0.2469009889678624 0.2458616787461111
0.7149385696840060 0.0770380580199507 0.0029633957087934
0.8808362657316720 0.0789953782417949 0.1250897116726691
0.5504053788718867 0.0793061744733376 0.2479199860834632
0.5458697507072907 0.0779202270130151 0.0662579421085770
0.7174993109525900 0.0764524093972386 0.1895240822536578
0.8845768949812378 0.0777836581493958 0.3119175830329030
0.8019544290056753 0.2461373453398220 0.0648827419081339
0.9691089182302589 0.2427410284209963 0.1866557947502086
0.6391361574808985 0.2421795356479934 0.3109489149670539
0.9685154744304230 0.2415499553352167 0.0010830504356001
0.6367678954661390 0.2408900640386818 0.1238620672706676
0.8044499695636559 0.2454745142266318 0.2463474662555989
0.2151718274533716 0.4099075653602187 0.0036945589250538
0.3804615024999967 0.4043670401068416 0.1250300442611952
0.0501612850101870 0.4087968123994356 0.2469653744639699
0.0446262642610560 0.4105258478604427 0.0667862979128848
0.2139739189003483 0.4122908700351673 0.1880502455724231
0.3555064255572099 0.3630611296536388 0.3292910458370187
0.3030124563451414 0.5768482453454811 0.0669223504543172
0.4690617662249781 0.5773300219733618 0.1790151386728268
0.1338364454596394 0.5770233552072352 0.3103284979750312
0.4677099333375054 0.5775303339616734 0.0018150089803108
0.1350105570226439 0.5775123763269794 0.1239474325178102
0.3111008807236978 0.5641831441818435 0.2510965501296950
0.7132312441098473 0.4108782945029218 0.0016830460594435
0.8782934705065172 0.4113088976651098 0.1274216751136558
0.5398273123792782 0.4344392413078444 0.2663904817221862
0.5482402534730393 0.4121426583628036 0.0679308815874159
0.7055863105207056 0.4072244723420130 0.1915922909300719
0.8869521421331251 0.4102965330161921 0.3111108091337055
0.8039407798246090 0.5773181147688570 0.0637912411280092
0.9697629166102426 0.5762672418857431 0.1876331532631825
0.6920131469610478 0.5770492847065408 0.3299973238198057
0.9699823826798823 0.5782576388272768 0.0003774474148600
0.6427707413831489 0.5770883194584294 0.1241834816293462
0.8012488309323862 0.5774810816055156 0.2446317329619282
0.2163916064729642 0.7442518107709217 0.0036962638876195
0.3807393277505756 0.7503157912097616 0.1253511065815074
0.0503106671927291 0.7453540840017367 0.2458637409963451
0.0472560573573289 0.7459072599661088 0.0665056624007788
0.2191863147126133 0.7364369989573288 0.1898699153246942
0.3746862221834719 0.7543066761924597 0.3073769309908373
0.3017572674706214 0.9175583473586433 0.0651862227083739

0.4753938663673764 0.9029242840358485 0.1909641073011282
 0.1380562869080690 0.9094539641072233 0.3108669353658664
 0.4689032450146502 0.9081577740102020 0.0014663758426677
 0.1393373878656595 0.9071484978511586 0.1260611445044717
 0.3013284313515093 0.9159227570907051 0.2438961439457448
 0.7135564036012184 0.7444145893397079 0.0018974855783399
 0.8826412891174595 0.7416209142987212 0.1262638401156396
 0.5568629117842228 0.7255106197588114 0.2550819296004474
 0.5490154994263916 0.7423755121051450 0.0685045718349949
 0.7146463582816696 0.7485615653596721 0.1885981169715322
 0.8892160587730916 0.7434591730746706 0.3115939448765174
 0.8022505379856250 0.9087053161823809 0.0656003142507040
 0.9686425834046863 0.9113235106586778 0.1855322883113272
 0.6395613042851455 0.9128731282798931 0.3102719080884968
 0.9676067206089752 0.9120870977770764 0.0007592772577971
 0.6358497808304007 0.9145491599215122 0.1243136394239040
 0.8068862584984205 0.9097185885912555 0.2467056155808462
 0.4909744288550251 0.5888482710337435 0.3626744226963312
 0.5127885368590995 0.7106131744866300 0.3865068236799726
 0.3859226478972735 0.0777585919885670 0.0350101367262783
 0.0511590183565675 0.0773155966455519 0.1567252183357512
 0.2203534160583444 0.0768375198425783 0.2778699846591873
 0.1334773734260782 0.2420298286512047 0.0345707643238295
 0.2999472583631200 0.2442651634192086 0.1570132753841343
 0.4710186242848212 0.2456235379546452 0.2790849833175313
 0.8844179717026724 0.0772237941076735 0.0349362254746748
 0.5530231107082033 0.0779494884715859 0.1581254229244929
 0.7207690914923942 0.0769311835271034 0.2780362788093854
 0.6336436951321267 0.2437714665338222 0.0348946059962072
 0.7993398108702388 0.2439513432558788 0.1565492696574962
 0.9679153904639620 0.2421799078442710 0.2777305668925052
 0.3837987637975537 0.4102911036840270 0.0354839664726271
 0.0505370253267354 0.4106483494236537 0.1560242826226893
 0.2116606774635493 0.4082889752829203 0.2774875356673112
 0.1333103233440881 0.5777691556504071 0.0356725138474618
 0.3043815032105063 0.5755411776182221 0.1578079810524632
 0.8834608366888874 0.4110080456086191 0.0347808629391461
 0.5494809181481264 0.4149630199538675 0.1554317249494940
 0.7184363324596541 0.4087083137157526 0.2795199812906564
 0.6345588007996082 0.5783630085381809 0.0346608516806333
 0.8008183879704575 0.5782122246937252 0.1567034099762927
 0.9662724163354062 0.5768567624711595 0.2778246750252254
 0.3847318536432815 0.7442597448259596 0.0363181015110076
 0.0518174086447241 0.7426429638184020 0.1565129728540508
 0.2179752057384640 0.7421535707063592 0.2774298846907187
 0.1345606576800973 0.9117502437203574 0.0349948469728103
 0.3016173525076953 0.9110028680618123 0.1571920377771628
 0.4690136313030612 0.9080081814868133 0.2788702917664188
 0.8853722283357955 0.7439548477790296 0.0345178845386425

0.5518447944055386 0.7403904266099045 0.1580723282568842
 0.7235541192365650 0.7476966580518710 0.2782993782407666
 0.6328474440718349 0.9103044967368321 0.0355630592432582
 0.8012893490896851 0.9108470320013472 0.1556334433045696
 0.9708689847548588 0.9100466327691035 0.2773363442110703
 0.4545530373518906 0.5995127961396104 0.2852164447601872
 0.3799108110031405 0.4147993047031721 0.3592379336081493
 0.6201620398354835 0.5690605203983529 0.3462353264119628
 0.4372103714066927 0.4090819419154675 0.4371891143742790
 0.3293320079796616 0.5260237139208475 0.4238697561745081
 0.451885952376555 0.5737177390842164 0.4600099650687891
 0.5824231909441311 0.6954567011150048 0.4032311710252845
 0.4108531236479788 0.5053505844988707 0.4354679013029193

(Fe SAC) TS₁₂₋₁₃ (Imaginary frequency = 404.45 cm⁻¹)

1.0000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Fe H C
74 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2117919798514308 0.0792991725216502 0.0012055081244452
 0.3837339064775813 0.0777335934893068 0.1282333801703758
 0.0494113786589172 0.0769695610492288 0.2469278583705960
 0.0478766416535158 0.0767747356062319 0.0675591285820132
 0.2138781068433223 0.0807003860409113 0.1884377528825722
 0.3825569695728188 0.0767994174252494 0.3114781512282325
 0.2994017249661344 0.2416910663027027 0.0662044597520440
 0.4707801250897301 0.2473122400236682 0.1898159111122454
 0.1323608383275504 0.2415049700139538 0.3109186558386487
 0.4663509013790514 0.2470738752507801 0.0023326917870787
 0.1342698169991217 0.2461209427258053 0.1250975272344923
 0.3029786200482180 0.2483687113974336 0.2464669484211797
 0.7136333024327883 0.0780314593290277 0.0034158805563896
 0.8811156637224399 0.0791209674735764 0.1257205553211248
 0.5504746815788222 0.0791921911700236 0.2488469374619575
 0.5454825774847962 0.0787743518303503 0.0671118819094508
 0.7154458696887610 0.0772190419878586 0.1894370945000949
 0.8845473015452257 0.0785835864647031 0.3127286763048111
 0.7995520959998975 0.2461059492861935 0.0661722925679345
 0.9667569458225358 0.2446547521084354 0.1875079149773281
 0.6373786633958269 0.2434788641953823 0.3128729032965791
 0.9656256361076330 0.2435538540843465 0.0017825796794742

0.6344153940716724 0.2435056304458571 0.1254344780385226
 0.8023100485281343 0.2441586511281360 0.2472852553534154
 0.2135689420177214 0.4117510819051149 0.0037305335588411
 0.3803659760313776 0.4072575482664620 0.1269148444107088
 0.0490703900273567 0.4104915184794431 0.2475777524257869
 0.0445964766371219 0.4110123906394166 0.0670931574763885
 0.2129885779598593 0.4137978979590862 0.1885930941231077
 0.3595766241686119 0.3714556161791068 0.3276454514581654
 0.3002521705301460 0.5777738293544130 0.0679540455638676
 0.4660285081429912 0.5804164889132892 0.1822599919288883
 0.1305009810596818 0.5787039063578673 0.3120815019102812
 0.4651949979613107 0.5779412652824296 0.0027104141534091
 0.1321332386069694 0.5785609195963264 0.1247812445476040
 0.3050827529965420 0.5712591594578562 0.2523576467402134
 0.7118678502470256 0.4113311790073371 0.0027760415080192
 0.8792615620912663 0.4126310551047134 0.1270332181788056
 0.5445874373486936 0.4211606944478418 0.2557463447796884
 0.5467973916902132 0.4131345942970782 0.0692120695136532
 0.7110729071269759 0.4083996996546473 0.1906524245584633
 0.8852227233261996 0.4104402418559158 0.3114344339399998
 0.8001254251695381 0.5782448898423872 0.0653137041019967
 0.9670361603985720 0.5778609394864646 0.1887795885059864
 0.6824450915663390 0.5780763595685044 0.3272920844757968
 0.9666771430513440 0.5785935316924610 0.0016039393199239
 0.6384847955860264 0.5779192381190502 0.1264193671301576
 0.7983029957443429 0.5792353265158411 0.2460402731975769
 0.2142127400268710 0.7438953273975928 0.0034689668219949
 0.3798298323452379 0.7502445888578184 0.1258707133126221
 0.0497546347116476 0.7465367345316378 0.2470585769050098
 0.0459986131331567 0.7468312681242948 0.0668689833841290
 0.2161932348943228 0.7393055641578221 0.1897498794220812
 0.3667512951642564 0.7735487782535635 0.3186628492488434
 0.2984461325429616 0.9155771134415537 0.0653389991344933
 0.4715270968810544 0.9081483105618295 0.1898503188304997
 0.1353109762258771 0.9130017472197330 0.3113525112488620
 0.4666383523726552 0.9097571475952383 0.0025185253511160
 0.1358364132521179 0.9096210441264330 0.1263430188719564
 0.3011854390715228 0.9124128768231902 0.2444132852239031
 0.7122948559917534 0.7453105192604313 0.0027838690101350
 0.8813126929261660 0.7429593474019921 0.1264920859181462
 0.5536432027671242 0.7387561765580289 0.2541298061954551
 0.5471817439758805 0.7429025640835114 0.0687784266079087
 0.7139292084381962 0.7493386148954801 0.1892566295647506
 0.8871155220555338 0.7460733654606061 0.3120625894869187
 0.8003696384946225 0.9103948750917360 0.0663642585514611
 0.9662968537658845 0.9117388549901277 0.1868891985303120
 0.6383592324447629 0.9145775413958211 0.3130211740425424
 0.9653692872057048 0.9126593910065849 0.0012601337915115
 0.6343281071266945 0.9134927547083528 0.1247514611087583

0.8039173430436473 0.9123310709406507 0.2475820253731957
 0.4472316454875113 0.5930375266605945 0.3624775648651597
 0.5247667418036382 0.5440361635458062 0.4013425646231576
 0.3828839544625064 0.0785609720574475 0.0358641010266322
 0.0493247015139675 0.0783609408263640 0.1569649446226919
 0.2179603779128576 0.0780294961742936 0.2779520028551131
 0.1321474090290768 0.2441825345041667 0.0351912177878687
 0.2988645339427332 0.2451600520981892 0.1573498729219293
 0.4688153967140856 0.2435152507652108 0.2786039641038711
 0.8826465496341193 0.0781348191294738 0.0352183276481007
 0.5509440688287596 0.0781591473719386 0.1573900883299111
 0.7188951994025634 0.0778244104977694 0.2793729012305477
 0.6314057474084426 0.2456754429961690 0.0362421414558731
 0.7984428069689768 0.2444739430273377 0.1567204264300836
 0.9670119227332288 0.2432150399230047 0.2782902602026126
 0.3831152375349132 0.4116870275214604 0.0368577939537600
 0.0487687609773431 0.4118691589450975 0.1565691081542383
 0.2104710064359358 0.4105385880668423 0.2780679024126057
 0.1318332898856137 0.5783288490986508 0.0360045671951426
 0.3012580199741424 0.5775757043480844 0.1583906005175526
 0.8818172806177963 0.4118543237051999 0.0355841317867559
 0.5481128307127731 0.4146391453106648 0.1595974762054345
 0.7188799260410156 0.4070732459448188 0.2789909261297469
 0.6319929987769206 0.5780512629395949 0.0364305086175629
 0.7989862400666601 0.5787514803984707 0.1574521116971889
 0.9646141139020427 0.5787069584388176 0.2786379670151884
 0.3825682240845670 0.7447215138940609 0.0366121938949740
 0.0496632955185938 0.7440599961547569 0.1570356227198502
 0.2155148083042374 0.7440169779251929 0.2784971395244881
 0.1321616448825877 0.9121905083216587 0.0352650542648267
 0.2993991320384889 0.9115602525326496 0.1570072224574552
 0.4669508429938767 0.9116868731414447 0.2786571597442957
 0.8827040371945551 0.7447089375966816 0.0353337839204629
 0.5500154642833843 0.7433523363679216 0.1583518163179811
 0.7212492909160593 0.7509790113247541 0.2790684569653880
 0.6316603172270998 0.9110250688055397 0.0358077254709248
 0.7995520373654158 0.9118155889864413 0.1562452539603494
 0.9689646348532124 0.9120719921878000 0.2780877691670125
 0.4619007045854989 0.5925714982395328 0.2762508408605826
 0.3863847454385989 0.4462586656771801 0.3464597157731196
 0.6360050467903778 0.5705363070989864 0.3591131036387669
 0.3097407239548537 0.6752054229519472 0.4110063744703861
 0.3569809134021633 0.8324091283800280 0.3984959461625168
 0.4470878523863248 0.7180720071180229 0.4278425524286193
 0.4882074444987369 0.4726378133500718 0.4173588615135432
 0.3776259497461439 0.7347305817839020 0.4024853694630799

(Fe SAC) TS7-8 (Imaginary frequency = 490.21 cm⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Fe H C
73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2098080180764368 0.0793935458332790 0.0010503696870474
0.3848723945674884 0.0785654465035442 0.1300666622786491
0.0491340516454514 0.0760453389098569 0.2478322263621196
0.0473632899998995 0.0761498384703941 0.0684271503135456
0.2112017762465993 0.0815485985497769 0.1875204918888025
0.3832748287767357 0.0747216494167244 0.3117547371209698
0.2998908238788421 0.2400813225045461 0.0659463136924087
0.4730481955265707 0.2523341087248387 0.1911596124979295
0.1320269903031964 0.2414102580522997 0.3112263870574529
0.4665131973114656 0.2481176298651537 0.0018357014614014
0.1345750735889083 0.2478642205966090 0.1246549514695067
0.3022650449245362 0.2450929265044703 0.2457355195414750
0.7134378863661952 0.0782349824030226 0.0038184544589295
0.8791687032888639 0.0800904710840847 0.1256531005038006
0.5493017556075490 0.0794956634987367 0.2483604265433959
0.5442664445826767 0.0794334933147323 0.0669626979614768
0.7156301203601940 0.0772449530071322 0.1900680298407938
0.8830726648753909 0.0786305680225509 0.3127667569611808
0.7994681571755881 0.2474836872147945 0.0659313052891605
0.9673736106626696 0.2436001641711697 0.1874787447469100
0.6361735595257407 0.2446380613971602 0.3110610490154889
0.9660126455733871 0.2429272836125155 0.0021135145555735
0.6345326988625264 0.2427902216007925 0.1252170302212024
0.8028868928917554 0.2453716617619990 0.2472999057604743
0.2127342840610189 0.4112001457849535 0.0041262014780145
0.3790715766336862 0.4065104316399611 0.1262446582476581
0.0485781054375800 0.4092143057288019 0.2480637564542830
0.0428954911082454 0.4119367588481060 0.0675040899446950
0.2126283442972647 0.4143760755762061 0.1892012565778462
0.3556619294180176 0.3607381937862170 0.3287684123874170
0.3004598327926739 0.5775890370873571 0.0674528771316757
0.4655775949409820 0.5807398468200744 0.1813550147075483
0.1329455389408717 0.5785700019868992 0.3104749816258158
0.4655335479371117 0.5782919242739775 0.0026196378481577
0.1329558252270653 0.5787470569359437 0.1245675449823285
0.3106193766610051 0.5659731049872792 0.2525088904618902
0.7109426764632599 0.4121919207467899 0.0026020765725889
0.8773950934485760 0.4125218905904741 0.1281505158406856
0.5394322540135069 0.4316932234930270 0.2600910691575037

0.5462556373070613 0.4133733642392184 0.0693429314817751
 0.7063320302955488 0.4082935313729789 0.1921518801684896
 0.8846565841174824 0.4112510970351989 0.3118283756554258
 0.8010115841436558 0.5783754302155466 0.0651173214187725
 0.9684537325850244 0.5774111680246691 0.1886841447347040
 0.6852218897128083 0.5798309271271055 0.3287318112712201
 0.9669848025642537 0.5788864484151739 0.0011840399575912
 0.6394299890035633 0.5781482504158064 0.1258022543272976
 0.8002160332393981 0.5788347082430697 0.2455309192196526
 0.2143593260890064 0.7449012028930422 0.0039509550098123
 0.3788005098434136 0.7508150144092176 0.1252383726018566
 0.0491073727976525 0.7473388595251226 0.2467931644173703
 0.0453731395295999 0.7465910620992632 0.0668786058097848
 0.2179624867726666 0.7368554318309535 0.1909095577364890
 0.3742212043603961 0.7613928578100986 0.3102542444430589
 0.2992037256611281 0.9181332233633410 0.0653614902739295
 0.4721518963194212 0.9050028590632707 0.1907076145761960
 0.1363858321799825 0.9107350207342256 0.3119329992794237
 0.4668577880859840 0.9097381165422506 0.0022369466865954
 0.1368580811713220 0.9071823706976204 0.1264629974760013
 0.2987451230911043 0.9172698640277828 0.2439877133152390
 0.7119914513059601 0.7454171703454325 0.0026474327917851
 0.8814308123192919 0.7425036470876013 0.1270187149947865
 0.5540044809285188 0.72879000950707451 0.2537085408862417
 0.5473256730472202 0.7435554548590142 0.0687715169529448
 0.7132877081371322 0.7498644376636114 0.1892002790528818
 0.8873546529601155 0.7447512442779145 0.3121921654490836
 0.8003116932073234 0.9095531184789813 0.0664770035355760
 0.9665921310035057 0.9126574943723861 0.1863705062634587
 0.6365244245142544 0.9122538521652959 0.3108117234731687
 0.9652879584944051 0.9132303140474233 0.0014867530426709
 0.6338852958069182 0.9152764498149025 0.1248321395470357
 0.8049991999860254 0.9114429661619119 0.2476406239984419
 0.4833706565986074 0.5472190133099175 0.3494381265409555
 0.3835441148100061 0.0790443393228868 0.0357032757925285
 0.0490793039524074 0.0782576833334361 0.1570948927148941
 0.2171580343889449 0.0777443214477409 0.2780806756657670
 0.1315242400405890 0.2437595759989329 0.0351365909601463
 0.2978739470401741 0.2451041263953244 0.1574501734799411
 0.4670839692981844 0.2430730356041696 0.2799835813611491
 0.8822339845312492 0.0783296848762715 0.0356444667733368
 0.5507089833565455 0.0791017157533991 0.1584114261077859
 0.7184799649392526 0.0777708781695207 0.2787616165374028
 0.6313945336032114 0.2457260388880632 0.0360989100427683
 0.7976642287114434 0.2450165070064171 0.1573022623093354
 0.9663234277440914 0.2430257475454035 0.2786157976785924
 0.3824794314185903 0.4113760603354950 0.0364148896963427
 0.0489076616349365 0.4116925541352661 0.1571018381190997
 0.2113392762035484 0.4078719066154753 0.2792337477523548

0.1309308067357343 0.5784781926368888 0.0360332887034543
 0.3011032093416428 0.5767512914301069 0.1574687300555400
 0.8815828328087786 0.4121778485870428 0.0357992171168332
 0.5474875308992938 0.4157526650963226 0.1581742044720153
 0.7188603700070365 0.4095967292243559 0.2805391475098599
 0.6323207088559306 0.5788497745705842 0.0357528815135863
 0.7989578523968924 0.5791520374682453 0.1576180858451450
 0.9659994386202460 0.5783876455860707 0.2784391708011246
 0.3824601393652978 0.7454183005040513 0.0364343268620606
 0.0500362829734508 0.7437904035283277 0.1573444844572325
 0.2174705777355622 0.7451138519525585 0.2789928567220920
 0.1321800169293453 0.9125601507806510 0.0353833805217190
 0.2993024334268062 0.9118786235641957 0.1572700972492885
 0.4659019233141906 0.9106488360879562 0.2790009127649051
 0.8830738947240416 0.7448752915190172 0.0352854597191234
 0.5504048586265550 0.7431515654891346 0.1578019902962300
 0.7223259681739569 0.7486252880395454 0.2794198822292497
 0.6313767678864698 0.9115360946407075 0.0359522274829021
 0.7995820925345917 0.9118249092989745 0.1564262196252204
 0.9687308758617375 0.9112938705889058 0.2783211862835105
 0.4564857393525175 0.5976084732617220 0.2783027527067821
 0.3955017608937974 0.4282596956384263 0.3478823007088584
 0.6148179441806212 0.5744128688651574 0.3476301797103727
 0.3926209315868751 0.5961829902181554 0.4709747419033208
 0.3174377363629319 0.6972088535234827 0.4268159630791543
 0.4468375153426236 0.7442747892959051 0.4503193084839023
 0.4343046998336101 0.6203210650361417 0.4017460165751881
 0.3966769551790790 0.6656349083723135 0.4386780101836253

(Fe SAC) TS8.9 (Imaginary frequency = 243.02 cm⁻¹)

1.000000000000000
 12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
 0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Fe H C
73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2088612350381855 0.0775798076182516 0.0017423231464989
 0.3833803127423119 0.0759011318274730 0.1303002980336542
 0.0479417633160102 0.0757092093238080 0.2485852973212837
 0.0469030617012458 0.0754168361660963 0.0694200228047802
 0.2112386116145173 0.0797664570185196 0.1890552649591382
 0.3814557969565756 0.0752802991856847 0.3123106541969661

0.2989235116141403 0.2380603207613101 0.0666005839302507
 0.4717692334385207 0.2474615949665832 0.1909870033309716
 0.1324648044068433 0.2409430650998168 0.3119758472798885
 0.4658134085399203 0.2459670711567641 0.0027299420623046
 0.1345341089485559 0.2466646116731397 0.1260664306675840
 0.3022728601961308 0.2457335319237504 0.2466006333717565
 0.7128984152652097 0.0767384223476013 0.0045860819314162
 0.8788219646996216 0.0777652063475026 0.1266105646285867
 0.5488326270959162 0.0765390453774714 0.2497404665639830
 0.5436160635560953 0.0770787910218808 0.0677624577367188
 0.7145345804951493 0.0756344974196850 0.1907494912392535
 0.8824527998000106 0.0771008396634915 0.3138175346620113
 0.7993136883511432 0.2459161349672858 0.0668746038575362
 0.9664472271376572 0.2427594563029231 0.1881689355991102
 0.6358898667472977 0.2426937464513829 0.3124595925317069
 0.9654260983097029 0.2412816906232835 0.0027248659666068
 0.6340156822050272 0.2405911258553569 0.1258004199549075
 0.8022458022989564 0.2426958114778779 0.2480721638760554
 0.2127224198240405 0.4099251421327660 0.0049247091749884
 0.3785404347193695 0.4041063358820865 0.1268296859303288
 0.0484083116999160 0.4080468632166027 0.2487996204006808
 0.0431688765272507 0.4097216523112626 0.0680995354923973
 0.2130963624392415 0.4149018682024383 0.1903625287264369
 0.3587867112879126 0.3642374178431120 0.3286627243145355
 0.2999282513412281 0.5763431097143572 0.0684491080072616
 0.4654090329875366 0.5775205146673789 0.1808681466160010
 0.1325299365345323 0.5767300679448047 0.3117109067332276
 0.4645886463815551 0.5765149141040098 0.0032570356475245
 0.1319442423307883 0.5772703988988016 0.1252523305466031
 0.3118074307656425 0.5695039483987051 0.2544749250933123
 0.7108729138434056 0.4102244371131801 0.0033569549922866
 0.8782268857785274 0.4117487869965192 0.1285487161893275
 0.5419798101524399 0.4242272456023297 0.2577194509454558
 0.5460289291226188 0.4115752333584893 0.0697830022296996
 0.7083579754399253 0.4061697328738054 0.1918802211540312
 0.8840281512522379 0.4094400059447383 0.3124630797540792
 0.8005944860989762 0.5770266532749481 0.0657025896725491
 0.9679740418991158 0.5766919617409285 0.1898488858925358
 0.6798224042477737 0.5764356602159000 0.3286679458856978
 0.9669257151791198 0.5776145965203099 0.0021098054504427
 0.6392899152856570 0.5763365677393685 0.1265047379556627
 0.7988916092218843 0.5768328541447543 0.2465661231248890
 0.2132124044078742 0.7429208523927937 0.0045857982753372
 0.3782500678492589 0.7495078094873293 0.1261151503021079
 0.0489142737379427 0.7462741104281903 0.2485893317580589
 0.0445425713825912 0.7456522415628665 0.0681087291543532
 0.2166542871255630 0.7352602234522887 0.1918281138025855
 0.3664728300765075 0.7742696692740899 0.3199753063233615
 0.2981684927226308 0.9155716080585129 0.0658568268007994

0.4716334938133334 0.9036097461365562 0.1915449421655856
 0.1349578931198933 0.9121982423828653 0.3128351352862319
 0.4661803492834673 0.9078416188940837 0.0028313232923162
 0.1361780405068416 0.9066128050418339 0.1274386366012128
 0.2990014336502885 0.9135233514804036 0.2447954516906675
 0.7113115347485071 0.7439512782141766 0.0033890932614419
 0.8801073679353181 0.7411852834847801 0.1282002900452439
 0.5487942972655863 0.7269876640379600 0.2554785270434129
 0.5463417958555634 0.7415536969182793 0.0694702605433192
 0.7110987406352035 0.7480238642350466 0.1907173030315599
 0.8852408699778994 0.7429584242470173 0.3130212269109100
 0.7998216894557446 0.9081080174625802 0.0672290029735332
 0.9662568467238658 0.9110490978071953 0.1876188674638581
 0.6359497224063612 0.9093686158980010 0.3121403165246772
 0.9648654748184243 0.9121341966884322 0.0022781484434866
 0.6335853021740283 0.9125491149625101 0.1254410560245727
 0.8038838463972018 0.9099083297123723 0.2485028773738861
 0.4728051395584666 0.5674058424598820 0.3554831166536122
 0.3826774738225207 0.0769125141217364 0.0365136946288079
 0.0487332617931940 0.0769842502870522 0.1581067686155885
 0.2165641291419592 0.0769752232274364 0.2791458525522008
 0.1311226381799575 0.2422999319267754 0.0360348940328891
 0.2979098899218270 0.2433248801962458 0.1582335427744576
 0.4670276568829247 0.2392264108685100 0.2799648584648353
 0.8818615750788305 0.0767728606121691 0.0364134705913462
 0.5498038758034505 0.0757288685489480 0.1591244685055277
 0.7174470200637556 0.0755375531489450 0.2797027814130256
 0.6308065367324533 0.2438821890000749 0.0367660551394656
 0.7976375405825996 0.2431877570328557 0.1576779730976070
 0.9660019035455086 0.2417239332634335 0.2793275636073710
 0.3818774976800234 0.4095698350686290 0.0371756652472839
 0.0487035764174108 0.4107307911933277 0.1578678997899723
 0.2111902241470602 0.4084772621895272 0.2798172738524531
 0.1303438136516847 0.5772281237069978 0.0367304239560571
 0.3003308679380718 0.5760901511262565 0.1581109734928873
 0.8815002138833949 0.4106672496288188 0.0365096207176343
 0.5478507845332203 0.4119966248570356 0.1587323142671596
 0.7193215256975105 0.4062886863137825 0.2805419185933222
 0.6318723747288164 0.5769418448345071 0.0365466925469768
 0.7982845832982045 0.5772752414106351 0.1584174675373734
 0.9656049685684167 0.5777192561675535 0.2792609202689837
 0.3818118045104829 0.7436486677095742 0.0370148690426696
 0.0499933874525063 0.7427496372694894 0.1587790825771325
 0.2189451339895593 0.7454103963208916 0.2815672992685564
 0.1314198449259007 0.9112241687719707 0.0361940205610400
 0.2985363490334160 0.9098752059423920 0.1581217277302177
 0.4630105499799468 0.9067323282279299 0.2812568447562397
 0.8825559832552581 0.7436157674444893 0.0364103706951355
 0.5490464133888535 0.7416006390561219 0.1584108250650479

0.7204108617563072 0.7471606367514536 0.2802369239260384
 0.6308646807198504 0.9095926227134394 0.0365642091488753
 0.7987537552358581 0.9101265392691379 0.1574529943076444
 0.9680263422139139 0.9102906297807749 0.2793592500083142
 0.4627440911958900 0.5810645498396165 0.2752521990447580
 0.3929225450549033 0.4322074581630517 0.3496725953319363
 0.6111483154031856 0.5763873401090303 0.3488590411100321
 0.5209685840481401 0.4122945774388196 0.4354920773336041
 0.3974555007279306 0.5010280538580547 0.4518684498049312
 0.5304567145470531 0.5773824617692584 0.4584210424577903
 0.4347629725313930 0.6447585199171988 0.3649195713019141
 0.4823526801193508 0.5005193363460650 0.4439524857236239

(Fe SAC) TS₁₁₋₉ (Imaginary frequency = 497.69 cm⁻¹)

1.0000000000000000
 12.6049995421999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 10.7748003006000008 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Fe H C
73 35 1 6 1

Selective dynamics

Direct

0.2126884924605533 0.0757671482364331 0.0009386235251822
 0.3844853201982171 0.0763076001908580 0.1276232323984690
 0.0499985228722755 0.0748638379714939 0.2466237345848917
 0.0483754864352271 0.0750079978048445 0.0671449587878103
 0.2146817492081806 0.0768940664912918 0.1881959383286730
 0.3828462659881102 0.0747756957143162 0.3112136656111286
 0.3001480268849428 0.2391083511667111 0.0652565213242264
 0.4728835165324169 0.2452854996546029 0.1894690555412555
 0.1336312731973009 0.2396385312669311 0.3102120422968341
 0.4678056993144290 0.2442412914976187 0.0019358172797433
 0.1357784957374916 0.2434644754480570 0.1248173772714563
 0.3041389004712239 0.2451476628331615 0.2456068682488514
 0.7146270009020612 0.0757156029695609 0.0027967664399634
 0.8819181637729052 0.0760856776226472 0.1254612173571867
 0.5509015055506820 0.0752978034123217 0.2486326606272225
 0.5465162008187457 0.0754538705064568 0.0667668884778293
 0.7160884105421487 0.0754169761181643 0.1891788921563917
 0.8851715452534644 0.0760729667290277 0.3122846709444792
 0.8013089253841668 0.2433360584209668 0.0657483280018555
 0.9678250406055287 0.2417593567316857 0.1869211452607556
 0.6389261820843432 0.2394940594280398 0.3125753249685015
 0.9667538484315422 0.2409519184319197 0.0011008673283374

0.6357188009990589 0.2407631566162303 0.1244869426924513
 0.8035172878811492 0.2422067020801840 0.2468943369352100
 0.2143064556205245 0.4092576545708820 0.0031647459810336
 0.3806419550636337 0.4041565353777110 0.1261199603999945
 0.0491552395352095 0.4080908033029070 0.2472197274495441
 0.0455278328871649 0.4078795045235531 0.0668201398403677
 0.2139076868072535 0.4113065646638236 0.1884948146090658
 0.3597364942641724 0.3693910347182536 0.3261963360062573
 0.3013747922139756 0.5752502949744438 0.0671432923460871
 0.4674030918839362 0.5757664622430655 0.1815965717000417
 0.1318963821325277 0.5752384565010646 0.3118299512480065
 0.4665879771984860 0.5753600040245297 0.0021062360263201
 0.1335928299939494 0.5753697966306101 0.1243596764106400
 0.3050025092873555 0.5725882893581503 0.2509015370830699
 0.7129270484278618 0.4086453365116941 0.0023812226860197
 0.8801256940636828 0.4100532505925540 0.1268561234049659
 0.5468893569822049 0.4168778278788999 0.2569483858291233
 0.5475349088463778 0.4106469730627339 0.0687263043820874
 0.7110967423856719 0.4056460511409277 0.1902751028944616
 0.8854164165250348 0.4083342857102596 0.3116711720094267
 0.8015829060857111 0.5754055481194151 0.0649257629847885
 0.9681669082958059 0.5759586216559347 0.1883250863736579
 0.6767166706205229 0.5792372756293065 0.3263776420186203
 0.9678247041312978 0.5755878614087936 0.0011064046680005
 0.6396032768700479 0.5757691093072724 0.1256738073374252
 0.7995409408143098 0.5754607163935634 0.2459794814074921
 0.2149712809492453 0.7415607916874071 0.0030600980724324
 0.3810595457262548 0.7465061954669187 0.1256920735617712
 0.0510611846683186 0.7436926478793815 0.2471819473455922
 0.0468035894609836 0.7434362601440058 0.0666551761301103
 0.2163015172588181 0.7381154411013390 0.1888176551776703
 0.3676031872574587 0.7725057666688128 0.3200509121466641
 0.3004844799308821 0.9124831187378161 0.0651220517952024
 0.4713462472183014 0.9066981863846235 0.1888259005439604
 0.1358282721451144 0.9112905709534505 0.3111298706400047
 0.4678130652248459 0.9073015914254349 0.0018143975328430
 0.1365941423274503 0.9074597097373278 0.1253077906435183
 0.3023825240472798 0.9086079812028161 0.2443583529977294
 0.7134964031434291 0.7423340349645230 0.0023185570354915
 0.8818457138156611 0.7407278902096267 0.1260790413907174
 0.5513908306721415 0.7367439852645559 0.2521049264143233
 0.5481539641447318 0.7408941926156926 0.0681368997444695
 0.7149245345614460 0.7459961697661172 0.1889784387413993
 0.8867703353755598 0.7432527890060268 0.3113349990409223
 0.8013266006762872 0.9078953690532895 0.0656873740841633
 0.9680765156634364 0.9088909986663275 0.1865574027304067
 0.6391505080734672 0.9105959960252720 0.3124630957975247
 0.9668523930417006 0.9098517803734448 0.0010488183907717
 0.6357067067580872 0.9104771701898877 0.1246179789710162

0.8049687213389385 0.9101480553684977 0.2468018758717122
0.4653358602983770 0.5807225074059393 0.3613027704600361
0.3841390457376844 0.0757929301816035 0.0354499828736774
0.0504958936085317 0.0756234031611331 0.1564928999866030
0.2187615373712986 0.0755530869799300 0.2777701356436840
0.1330619126183911 0.2413990240830623 0.0347824542728929
0.2997039164327598 0.2423924729822241 0.1569168199938557
0.4691473164703434 0.2387480862279131 0.2783400550315858
0.8838668590826946 0.0756162888410530 0.0348306566508173
0.5517888652464419 0.0754035297776242 0.1570884286561936
0.7195815918422781 0.0752276003751489 0.2789616803227764
0.6327813433884363 0.2426327157381284 0.0354943054750941
0.7993898993286266 0.2419294150615338 0.1562879073748657
0.9678467732258247 0.2407805234556836 0.2778982765397934
0.3836497073638061 0.4089582423829609 0.0362270015207944
0.0496195473490309 0.4092410869411600 0.1563128139693635
0.2114172026367676 0.4088264934655810 0.2776357614457793
0.1327561433589027 0.5756111155688015 0.0354977884516075
0.3016802069967724 0.5751452190770605 0.1578647004405598
0.8831295074400096 0.4090857862439317 0.0351237331068586
0.5495555462874151 0.4114220411328932 0.1579463048366417
0.7198260879326137 0.4044730348237082 0.2789560489249576
0.6332215727237819 0.5759136286469068 0.0357896709171373
0.7999110592068142 0.5760065901153504 0.1571006543206287
0.9655165265049893 0.5762366236766131 0.2782895501934566
0.3840624421341687 0.7420730737085223 0.0361300012994928
0.0508772745416571 0.7416578922895943 0.1566874074597438
0.2172490365549281 0.7415274697256280 0.2783065939194777
0.1332939008323697 0.9094139101370747 0.0348261832053884
0.3004848437177840 0.9088142002069020 0.1565199259404996
0.4669835055454099 0.9071951767580304 0.2786512058603600
0.8837988669952952 0.7418957071870868 0.0350778740005065
0.5505782224565073 0.7408807682090833 0.1582371885081990
0.7212114517278875 0.7485603127839516 0.2780410541683354
0.6326124247283625 0.9082620604077462 0.0354014124127209
0.8005685917277188 0.9093644285061959 0.1558941818487818
0.9698607109620461 0.9094207858958639 0.2777129262291004
0.4647681545373975 0.5789697057764479 0.2731338861270681
0.3893313568150162 0.4411491980592112 0.3462656177607151
0.6078976235140982 0.5857697022947097 0.3455245400083244
0.3623510965550846 0.6359320943608984 0.4265238182820644
0.3221359033712408 0.7846467336312862 0.3990952005740455
0.4620512584154962 0.7589175464270561 0.4148390863386526
0.4913506551571267 0.5311215676383861 0.3916429736600581
0.3861216155491896 0.7181173102638890 0.4038855999498645

(Fe SAC) TS14-15 (Imaginary frequency = 208.69 cm⁻¹)

1.000000000000000
12.604999542199999 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 10.774800300600008 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 24.7276000977000017

O Zr Fe H
74 35 1 4

Selective dynamics

Direct

0.2143040508735728 0.0780347935341380 0.0039512371102779
0.3850057027143868 0.0775564380545555 0.1301328048710589
0.0504824435759619 0.0778670867680947 0.2490521561855321
0.0498616954067981 0.0774515377844271 0.0698874852888137
0.2156577313639836 0.0779657847695513 0.1907678621913619
0.3842700001991732 0.0779195099061826 0.3124246528248280
0.3011045817148398 0.2419848569543314 0.0682981889570116
0.4724716305556547 0.2458404921312701 0.1919211707578973
0.1348997388390594 0.2414033223370028 0.3132446146634921
0.4681017273120073 0.2461956451148657 0.0047024756917499
0.1370535784781137 0.2462381997561503 0.1280400792921427
0.3031644892769485 0.2468340941965313 0.2475201152053443
0.7156504801708198 0.0775766435192853 0.0056346840187231
0.8828243915771788 0.0778688866090258 0.1278690569589653
0.5526529694288661 0.0774344964805018 0.2510443843373337
0.5476546668026210 0.0779548316804459 0.0693810472369688
0.7171471758020961 0.0777273806200385 0.1913944005613154
0.8859012473812305 0.0778353354439933 0.3151484975072714
0.8014531578712408 0.2456372388273335 0.0686157926975810
0.9683017100321062 0.2443419682442038 0.1892954762678109
0.6384271686183031 0.2435184070824132 0.3139475005632835
0.9672554297684464 0.2431391894350061 0.0040807444388100
0.6359077265365645 0.2434899879211961 0.1275075573413720
0.8049563292597632 0.2434338926193617 0.2496601713943212
0.2156261142871586 0.4117973512484746 0.0058868518917814
0.3827642147256574 0.4076951949667919 0.1292010810146283
0.0509287581526955 0.4090975699518472 0.2499878446574972
0.0471252657448605 0.4097139601080959 0.0693757460595725
0.2159094099264725 0.4160862633468707 0.1918092732246303
0.3613806169933570 0.3648710495801893 0.3284354742330450
0.3019339969587016 0.5775835468088498 0.0703432818769214
0.4670405140703792 0.5786430828293896 0.1872640203240468
0.1317969863737589 0.5781361879697965 0.3133821588117384
0.4667598669954804 0.5777082568013635 0.0049243252614485
0.1340719022160497 0.5778465955488349 0.1268399028598367
0.3083982881184313 0.5768832975550620 0.2558872584830071
0.7140203879762259 0.4107733138881661 0.0049196287430182
0.8820041005346206 0.4128128207542183 0.1290430408146984
0.5487108460727176 0.4198194071930143 0.2557332114816098

0.5487968788528691 0.4126483835262164 0.0710444528601526
 0.7143624470151199 0.4073991974305095 0.1924592750640049
 0.8866839268868790 0.4105799885166940 0.3138088989716510
 0.8008780495042015 0.5777256645937463 0.067822341103924
 0.9696316297783080 0.5776849932765968 0.1909850417819811
 0.6823357827033668 0.5783491781460431 0.3291637068633862
 0.9679424097142201 0.5776621911620080 0.0042122452779203
 0.6384369066175840 0.5774911680548985 0.1291402835291793
 0.8013412511797706 0.5781105263618206 0.2479245197415356
 0.2157544712256307 0.7434548837177821 0.0057951677139954
 0.3824811418450281 0.7480238286053870 0.1288335624899948
 0.0508288526797153 0.7467503306427504 0.2498045478361704
 0.0472982685286414 0.7459431727369997 0.0692929044115807
 0.2162839307436313 0.7390407613607772 0.1919431287821667
 0.3611666228760988 0.7905970965649901 0.3273071346146842
 0.3008823102306162 0.9137513593910034 0.0680000379446440
 0.4727167263472405 0.9090258816805874 0.1919765310294662
 0.1348414258367809 0.9142730644485424 0.3131709145590394
 0.4683435960446466 0.9093960163190734 0.0047804067332773
 0.1372638511112927 0.9090943730167280 0.1281712720671996
 0.3033560865697785 0.9089846400891490 0.2471589811277625
 0.7140525995994320 0.7446578462099122 0.0049075444798154
 0.8823512011628281 0.7425243590128880 0.1290028859402624
 0.5502430655376793 0.7366117283268210 0.2562340538537630
 0.5489805654377358 0.7426600346064232 0.0710342368770886
 0.7145134297615562 0.7482305547160776 0.1921256117358155
 0.8870856734296144 0.7453326730754316 0.3139249440463476
 0.8016805957992171 0.9096654164230270 0.0686550753391773
 0.9682230168733879 0.9113769858099749 0.1892266434605292
 0.6387939021457645 0.9126322953806979 0.3145029604076610
 0.9671770612144566 0.9122191581662946 0.0039242766548623
 0.6359738821242442 0.9123413258871437 0.1272912728168672
 0.8049151846106751 0.9122177479693022 0.2496275609120949
 0.4807723598144667 0.5604097730524558 0.3418137934040400
 0.3934707605841366 0.6184614540597155 0.395111226536561
 0.3846104924626495 0.0778735224896830 0.0381354971295572
 0.0511747116083929 0.0777852276090064 0.1591850544584777
 0.2193575534284454 0.0778476625170622 0.2802399228063192
 0.1340931112806126 0.2439819843542421 0.0376555243571689
 0.3008785680962759 0.2447681682938226 0.1596542450638956
 0.4693918938557123 0.2418514656773417 0.2810803713673332
 0.8843697561888626 0.0776166922079205 0.0375361548917819
 0.5525217637631391 0.0776492127096562 0.1594523344702243
 0.7204627449986735 0.0777775931499652 0.2812626866568549
 0.6334424891842375 0.2451761639486498 0.0381956688212750
 0.8008676621494535 0.2441895881615322 0.1588895521045156
 0.9690761159301385 0.2430870030092193 0.2805100835936060
 0.3848313134499253 0.4112544079274489 0.0390369659258657
 0.0509848578606044 0.4116592049701495 0.1592473555606306

0.2138486545021142 0.4101849091497270 0.2816174390919197
0.1335678503722028 0.5776876286826164 0.0381787165354701
0.3016494427752273 0.5776145982285464 0.1605340201710886
0.8839733958828905 0.4111702836773228 0.0378723431970707
0.5510529436970275 0.4122506606415334 0.1614781178328602
0.7218184298248802 0.4074567110235738 0.2816987502239433
0.6337011781829478 0.5776034520707567 0.0385891183752143
0.8004385253337241 0.5777670282031737 0.1597456501231203
0.9665713923256928 0.5779773452654497 0.2808178466766088
0.3846815033193352 0.7442418034826120 0.0389293627650950
0.0510470425848325 0.7438656500985430 0.1592403098651079
0.2140259290769023 0.7457587925199828 0.2813822234625775
0.1341321736195932 0.9114606788371182 0.0376275439052869
0.3010582688020591 0.9107534033078545 0.1595211277564798
0.4693461905580432 0.9131914504103597 0.2813772370619815
0.8840570648897420 0.7441327842980949 0.0378162147544347
0.5514140634085919 0.7436470575954062 0.1610263919327215
0.7220653332576393 0.7486180513757459 0.2816723184193570
0.6335602275080139 0.9104014433343257 0.0380290038143682
0.8010351396390262 0.9113369761539087 0.1588204317371367
0.9691114130158673 0.9126594995795856 0.2805309198605627
0.4647759944696125 0.5808386260460487 0.2706897781398078
0.3998210139359382 0.4355812362574448 0.3462183124826002
0.6087546406401314 0.5770911199204951 0.3453388416841394
0.4500974585706889 0.6270559906672588 0.4218720401847479
0.3797447469025197 0.7304633692855901 0.3583955939414747