

## SUPPORTING INFORMATION

# Copper Coordination to Water and Ammonia in Cu<sup>II</sup>-Exchanged SSZ-13: Atomistic Insights from DFT Calculations and *In Situ* XAS Experiments

*B. Kerkeni,<sup>1,2,3</sup> D. Berthout,<sup>1</sup> D. Berthomieu,<sup>4</sup> D. E. Doronkin,<sup>5,6,\*</sup> M. Casapu,<sup>5</sup>  
J.-D. Grunwaldt,<sup>5,6</sup> C. Chizallet<sup>1,\*</sup>*

<sup>1</sup> IFP Energies Nouvelles, Rond-point de l'échangeur de Solaize, BP3, 69360 Solaize, France ;  
Institut Carnot IFPEN Transports Energie

<sup>2</sup> Faculté des Sciences de Tunis, Laboratoire Physique de la Matière Condensée, 2092  
Université Tunis El Manar, Tunisia

<sup>3</sup> Université de la Manouba, Institut Supérieur des Arts Multimédia de la Manouba, 2010, la  
Manouba, Tunisia

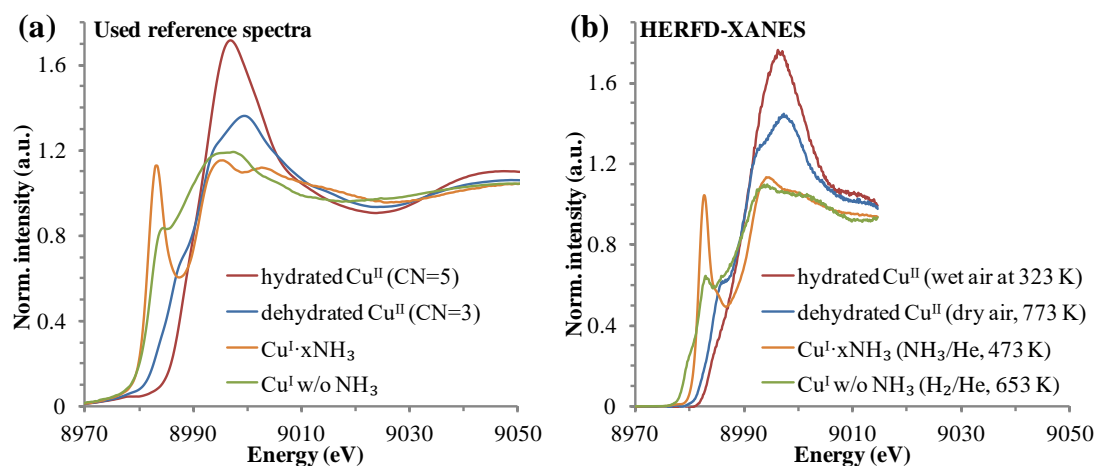
<sup>4</sup> Institut Charles Gerhardt Montpellier, UMR 5253 CNRS-ENSCM-UM, Montpellier, France

<sup>5</sup> Institute for Chemical Technology and Polymer Chemistry, Karlsruhe Institute of  
Technology, 76131 Karlsruhe, Germany

<sup>6</sup> Institute of Catalysis Research and Technology, Karlsruhe Institute of Technology, 76344  
Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

Corresponding authors : [celine.chizallet@ifpen.fr](mailto:celine.chizallet@ifpen.fr), [dmitry.doronkin@kit.edu](mailto:dmitry.doronkin@kit.edu)

## S1. Reference XANES spectra representing different Cu species



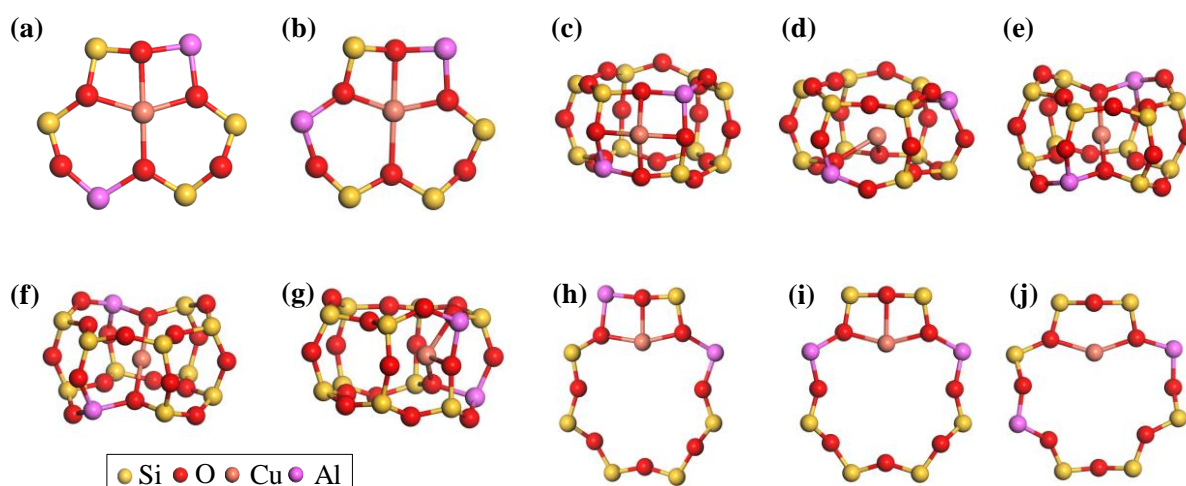
**Figure S1.** (a) Reference spectra used for linear combination analysis of *in situ* XANES spectra. (b) HERFD-XANES spectra of the Cu-SSZ-13 zeolite acquired under model conditions and assigned to individual Cu site structures in ref. [T. Günter, H.W.P. Carvalho, D.E. Doronkin, T. Sheppard, P. Glatzel, A.J. Atkins, J. Rudolph, C.R. Jacob, M. Casapu, J.-D. Grunwaldt, Structural Snapshots of the SCR Reaction Mechanism on Cu-SSZ-13, Chem. Commun. 51 (2015) 9227–9230].

## S2. Computational sampling of respective locations for aluminum and copper in Cu-SSZ-13

Several locations for the two substituted aluminum were sampled (Table S1, Figure S2). For periodicity reasons, some of the configurations do not obey the Lowenstein's rule. For the following of the study, the most stable "6MR" and "8MR" one were considered, whereas the most stable one belonging to the "D6R" family was discarded due to the lack of accessibility of the copper ion.

**Table S1.** Configurations investigated for the location of Al and Cu in the cell, with their relative energy (referenced to the most stable configuration). The configurations marked \* do not obey the Lowenstein's rule.

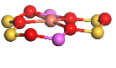
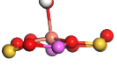
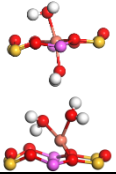
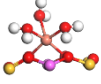
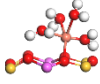
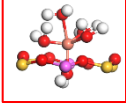
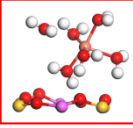
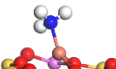
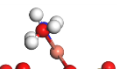
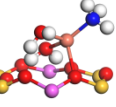
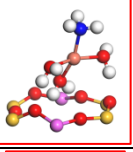
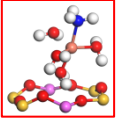
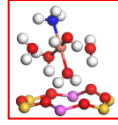
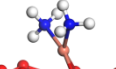
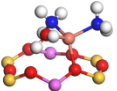
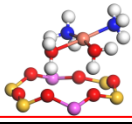

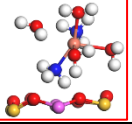

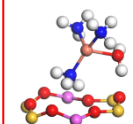
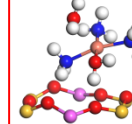
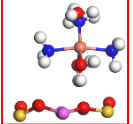
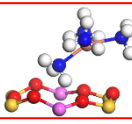
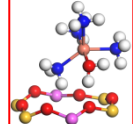
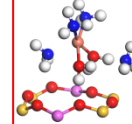
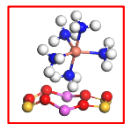
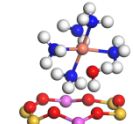

Location of aluminum atoms	Figure	Relative energy (kJ.mol <sup>-1</sup> )
Same 6MR	S2.1.a	0
Same 6MR	S2.1.b	+31
Same D6R	S2.1.c	+118
Same D6R*	S2.1.d	+137
Same D6R	S2.1.e	+64
Same D6R*	S2.1.f	+138
Same D6R	S2.1.g	+122
Same 8MR	S2.1.h	+97
Same 8MR	S2.1.i	+171
Same 8MR	S2.1.j	+188



**Figure S2.** Structures of the configurations mentioned in Table S1: (a) Cu<sup>II</sup> at 6MR, two aluminum atoms in the same 6MR, diagonal positions, (b) Cu<sup>II</sup> at 6MR, two aluminum atoms in the same 6MR, non-diagonal positions, (c) Cu<sup>II</sup> at 4MR, two aluminum atoms in different 6MR, same D6R, (d), (e), (f) and (g) Cu<sup>II</sup> at D6R, two aluminum atoms in the same D6R, but with different Al location, (h), (i) and (j) Cu<sup>II</sup> at 8MR, two aluminum atoms in the same 8MR, but with different positions.

### S3. Most stable structures found by DFT calculations for each (n,m) value

**Table S2.** Structures for Cu<sup>II</sup> initially located at the 6MR. Red = O, Yellow = Si, Purple = Al, Blue = N, White = H. Structures appearing in red boxes are the cases where the Cu complex is not connected to the framework.

6MR	n=0	n=1	n=2	n=3	n=4	n=5	n=6
m=0							
m=1							-
m=2						-	-
m=3					-	-	-
m=4				-	-	-	-
m=5			-	-	-	-	-
m=6		-	-	-	-	-	-

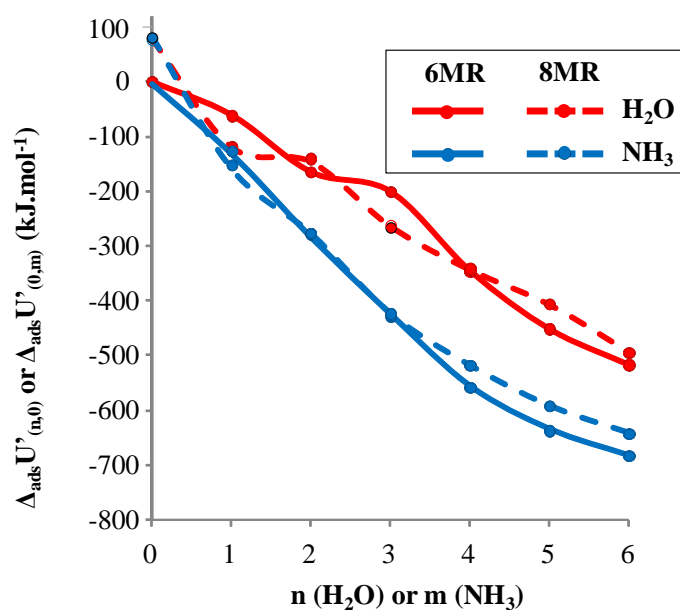
**Table S3.** Structures for Cu<sup>II</sup> initially located at the 8MR. Same color code at Table S2. Structures appearing in red boxes are the cases where the Cu complex is not connected to the framework.

8MR	n=0	n=1	n=2	n=3	n=4	n=5	n=6
m=0							
m=1							-
m=2						-	-
m=3					-	-	-
m=4				-	-	-	-
m=5			-	-	-	-	-
m=6		-	-	-	-	-	-

## S4. Adsorption energies of water or ammonia, taking into account the respective stabilities of Cu<sup>II</sup> in 6MR versus 8MR

The cumulated adsorption energy of water and / or ammonia  $\Delta_{\text{ads}}U_{(n,m)}$  is defined by equation 1 in the manuscript. The reference energy for the systems without any water or ammonia is that of the considered configuration for copper (either at the 6MR or at the 8MR). We redefine another cumulated adsorption energy  $\Delta_{\text{ads}}U'_{(n,m)}$ , taking as a reference the system with copper at 6MR (the most stable one), cf. equation S4.1. For water or ammonia independent adsorption, the results are reported in Figure S3.

$$\Delta_{\text{ads}}U'_{(n,m)} = U_{\text{zeo}(n,m)} - U_{\text{zeo}(0,0),6\text{MR}} - n U_{\text{water}} - m U_{\text{ammonia}} \quad \text{Equation S4.1}$$



**Figure S3.** Cumulated adsorption energies at copper, for the adsorption of H<sub>2</sub>O (n molecules) or NH<sub>3</sub> (m molecules) independently, close to copper located in the 6MR or 8MR, choosing as a reference copper at the 6MR. Lines serve as a guide to the eye.

**S5. Structural analysis for the species expected at  $P(\text{NH}_3) = 10^{-3}$  bar (adsorption of ammonia alone), or for  $P(\text{H}_2\text{O}) = 10^{-2}$  bar and  $P(\text{NH}_3) = 10^{-3}$  bar (co-adsorption of ammonia and water)**

Tables S4 and S5 report the  $\text{Cu}^{\text{II}}\text{-O}$  and  $\text{Cu}^{\text{II}}\text{-N}$  distances for copper at 6MR and 8MR respectively. The stoichiometries reported are represented at  $P(\text{NH}_3) = 10^{-3}$  bar (adsorption of ammonia alone), or at  $P(\text{H}_2\text{O}) = 10^{-2}$  bar and  $P(\text{NH}_3) = 10^{-3}$  bar (co-adsorption of ammonia and water), between 323 and 823 K. Copper-ligand distances higher than 2.3 Å are not considered in the numbering.

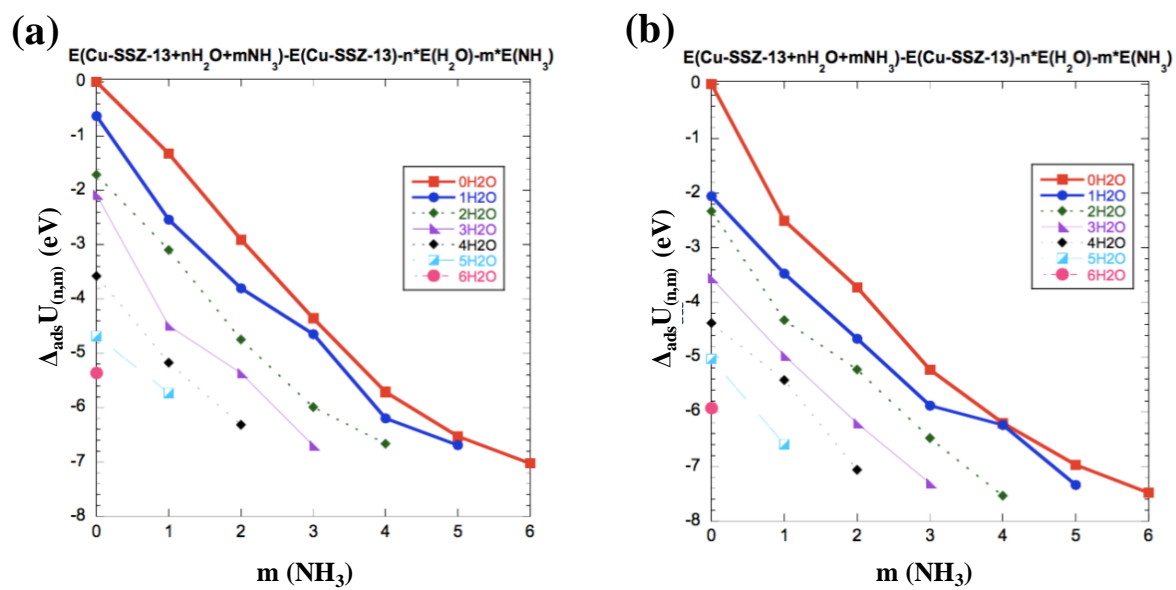
**Table S4.**  $\text{Cu}^{\text{II}}\text{-O}$  and  $\text{Cu}^{\text{II}}\text{-N}$  distances (Å) for copper at 6MR, for the given stoichiometry. Blue numbers correspond to Cu-N distances (N comes from adsorbed ammonia), red ones to Cu-O distances (O belonging to the zeolitic framework).

m = 4	m = 1	m = 0
2.003	1.972	1.949
2.004	1.942	2.012
2.018	2.021	2.032
2.022	2.248	2.093

**Table S5.**  $\text{Cu}^{\text{II}}\text{-O}$  and  $\text{Cu}^{\text{II}}\text{-N}$  distances (Å) for copper at 8MR, for the given stoichiometry. Blue numbers correspond to Cu-N distances (N comes from adsorbed ammonia), red ones to Cu-O distances (O belonging to the zeolitic framework).

m = 4	m = 3	m = 2	m = 1
1.996	1.997	1.943	1.930
2.026	2.024	2.037	1.936
2.027	1.997	1.968	2.072
2.034	2.059	2.220	2.082

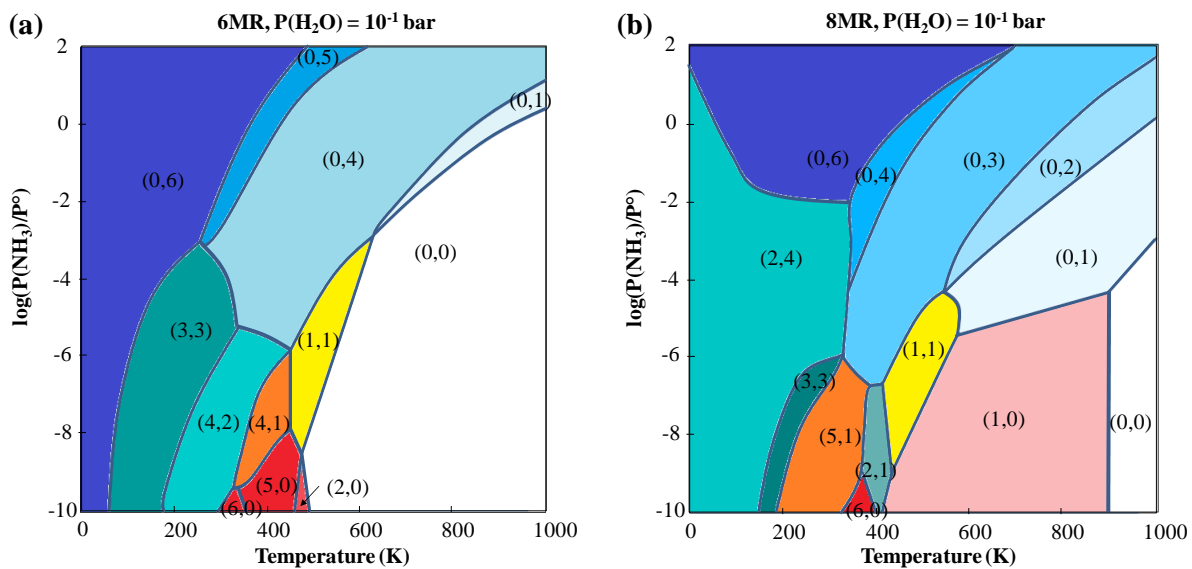
## S6. Adsorption energies of water plus ammonia



**Figure S4.** Cumulated adsorption energies at copper sites, for the co-adsorption of H<sub>2</sub>O ( $n$  molecules) and NH<sub>3</sub> ( $m$  molecules), close to copper located in the 6MR (a) or 8MR (b).

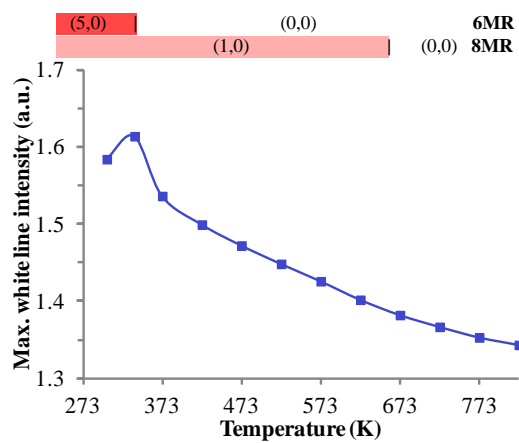


## S7. Thermodynamic diagrams for ammonia and water co-adsorption for $P(\text{H}_2\text{O}) = 10^{-1}$ bar



**Figure S5.** Phase diagrams from DFT calculations for  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{NH}_3$  co-adsorption at 6MR (a) and 8MR (b), drawn as a function of  $P(\text{NH}_3)$  (at constant  $P(\text{H}_2\text{O}) = 10^{-1}$  bar). The most stable systems in given conditions are called by (n,m), n being the number of water molecules, m the number of ammonia molecule per  $\text{Cu}^{\text{II}}$ .

## S8. Variation of the white line intensity in the XANES spectra recorded during the dehydration experiment



**Figure S6.** Maximum white line intensity (peaks around 9000 eV) in the Cu K XANES spectra obtained during heating Cu-SSZ-13 zeolite in He with  $P(\text{O}_2) = 10^{-2}$  bar and rest  $P(\text{H}_2\text{O}) = 10^{-5}$  bar. Temperature ramp rate 10 K/min. Text lines on top of the graphs depict theoretical stability regions for Cu sites with H<sub>2</sub>O and NH<sub>3</sub> ligands at 6MR and 8MR (derived from Figure 3).

## S9. Structural analysis of the first coordination shell of Cu species during heating Cu-SSZ-13 zeolite in different model gas environments

**Table S6.** Results of fitting the Cu-SSZ-13 EXAFS spectra obtained during heating in He with  $P(O_2)=10^{-2}$  bar and  $P(H_2O)=10^{-5}$  bar.

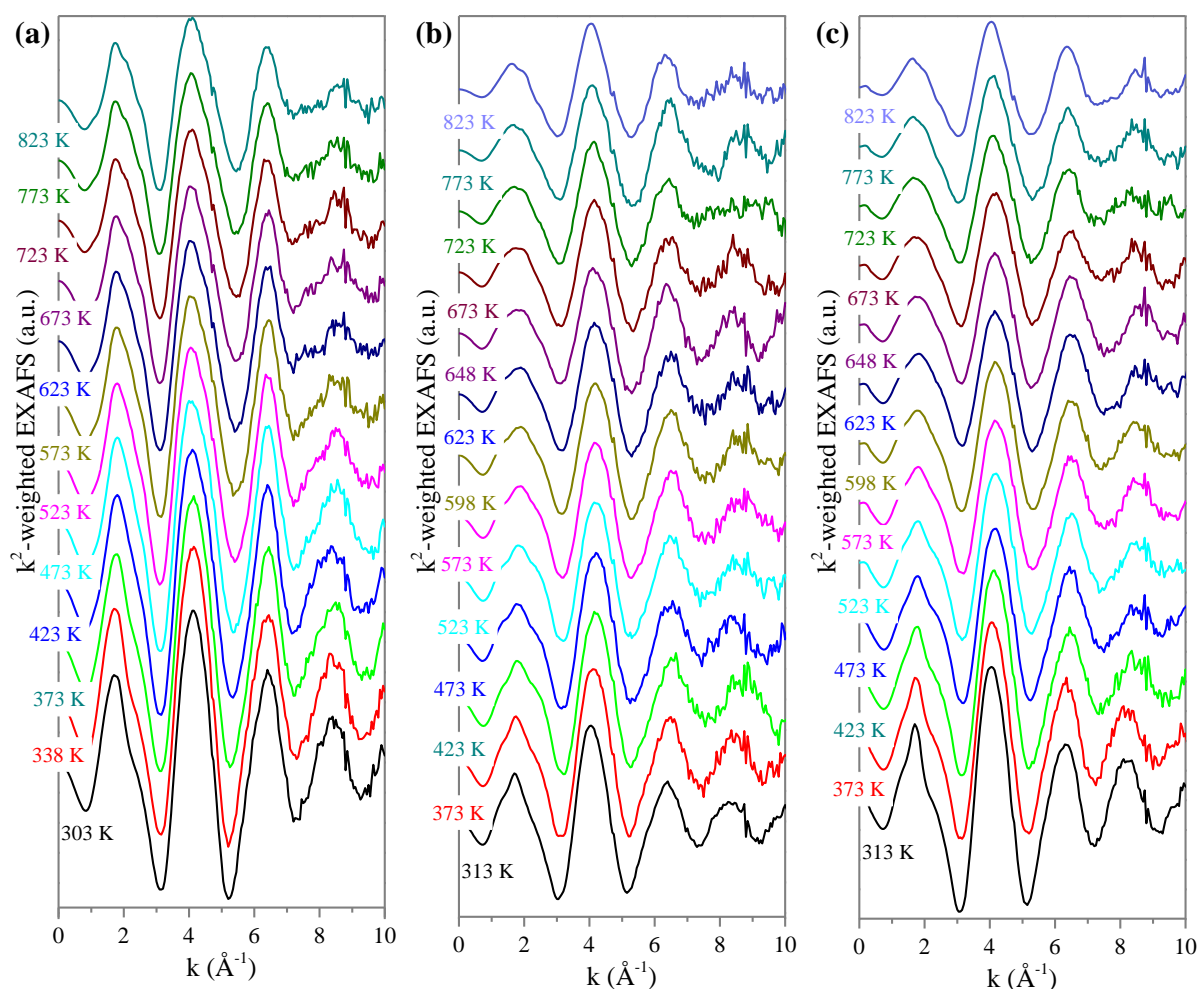
Temperature (K)	d (Cu-ligand, Å)	CN (ligand)	$\sigma^2$ ( $10^{-3}$ Å <sup>2</sup> )	$\delta E_0$ (eV)	$\rho$ (%)
303	1.94±0.04	4.3±1.5	4.1±6.1	-1.2±3.6	0.4
338	1.93±0.03	4.5±1.5	4.3±5.7	-1.8±3.5	0.4
373	1.93±0.03	4.3±1.3	4.7±5.2	-1.2±3.2	0.3
423	1.94±0.03	4.2±1.3	5.2±5.6	-0.2±3.1	0.3
473	1.92±0.02	3.9±0.7	4.5±3.0	-1.5±1.8	0.1
523	1.92±0.02	3.8±0.7	5.7±3.2	-1.8±1.8	0.1
573	1.91±0.02	3.7±0.8	6.5±4.0	-2.0±2.0	0.1
623	1.91±0.03	3.7±0.9	7.7±4.5	-2.6±2.4	0.1
673	1.92±0.02	3.3±0.6	6.7±3.3	-2.2±1.8	0.1
723	1.92±0.02	3.1±0.5	6.9±2.8	-2.3±1.5	0.1
773	1.92±0.02	3.1±0.5	7.7±3.1	-2.4±1.7	0.1
823	1.91±0.02	3.1±0.6	8.8±4.0	-3.0±2.1	0.1

**Table S7.** Results of fitting the Cu-SSZ-13 EXAFS spectra obtained during heating in He with  $NH_3$  ( $P(NH_3)=10^{-3}$  bar).

Temperature (K)	d (Cu-ligand, Å)	CN (ligand)	$\sigma^2$ ( $10^{-3}$ Å <sup>2</sup> )	$\delta E_0$ (eV)	$\rho$ (%)
313	1.95±0.04	2.9±1.0	7.4±6.5	-2.1±3.4	0.4
373	1.93±0.03	2.6±0.8	5.3±5.6	-1.6±3.2	0.4
423	1.90±0.04	2.3±0.9	5.0±6.6	-2.2±4.1	0.6
473	1.92±0.05	2.4±1.1	6.5±9.0	-0.9±4.8	0.9
523	1.91±0.04	2.1±0.8	5.4±7.2	-1.1±4.2	0.7
573	1.90±0.04	2.0±0.8	4.1±7.0	-2.1±4.4	0.8
598	1.90±0.04	1.95±0.8	4.2±7.0	-2.5±4.4	0.8
623	1.91±0.04	1.95±0.8	4.8±6.7	-2.4±4.1	0.6
648	1.93±0.05	1.75±0.9	3.0±8.3	-0.6±5.4	1.3
673	1.91±0.03	1.85±0.5	4.0±4.8	-2.7±3.1	0.4
723	1.92±0.07	2.3±1.6	10.6±13.7	-3.0±6.8	1.6
773	1.88±0.04	1.9±0.9	4.4±7.2	-6.6±5.0	0.8
823	1.92±0.04	1.9±0.6	6.6±6.1	-4.1±3.6	0.5

**Table S8.** Results of fitting the Cu-SSZ-13 EXAFS spectra obtained during heating in He with NH<sub>3</sub> and H<sub>2</sub>O (P(NH<sub>3</sub>) = 10<sup>-3</sup> bar, P(H<sub>2</sub>O) = 10<sup>-2</sup> bar).

Temperature (K)	d (Cu-ligand, Å)	CN (ligand)	$\sigma^2$ (10 <sup>-3</sup> Å <sup>2</sup> )	$\delta E_0$ (eV)	$\rho$ (%)
313	1.97±0.04	3.75±1.3	4.6±6.4	-0.3±3.5	0.4
373	1.97±0.04	3.3±1.4	4.9±7.6	0.5±4.0	0.6
423	1.93±0.04	3.2±1.2	5.8±7.0	-1.2±3.9	0.5
473	1.92±0.05	2.85±1.5	6.4±9.8	-1.3±5.1	1.0
523	1.91±0.04	2.6±1.1	5.7±7.4	-1.7±4.2	0.6
573	1.90±0.04	2.3±0.8	4.3±5.7	-2.1±3.5	0.5
598	1.91±0.04	2.3±0.8	4.8±6.3	-2.3±3.8	0.5
623	1.89±0.05	2.2±1.1	4.4±8.7	-3.8±5.4	1.0
648	1.89±0.04	2.0±0.8	3.5±6.5	-4.1±4.3	0.7
673	1.91±0.04	2.2±0.8	6.1±7.0	-3.0±4.1	0.6
723	1.92±0.05	2.3±1.1	7.8±9.6	-2.8±5.0	0.9
773	1.91±0.03	2.1±0.5	5.7±4.1	-4.3±2.5	0.2
823	1.91±0.04	2.0±0.6	5.4±5.6	-5.2±3.5	0.4



**Figure S7.** k<sup>2</sup>-weighted EXAFS spectra obtained during heating in: (a) He with P(O<sub>2</sub>) = 10<sup>-2</sup> bar and P(H<sub>2</sub>O) = 10<sup>-5</sup> bar; (b) He with NH<sub>3</sub> (P(NH<sub>3</sub>) = 10<sup>-3</sup> bar); (c) He with NH<sub>3</sub> and H<sub>2</sub>O (P(NH<sub>3</sub>) = 10<sup>-3</sup> bar, P(H<sub>2</sub>O) = 10<sup>-2</sup> bar).

## S10. Coordinates of the computed structures

The systems are named according to the following terminology: Site (n,m), with Site = 6MR or 8MR, n being the number of water molecules, m the number of ammonia molecule per Cu<sup>II</sup>. The coordinates are given in cif (crystallographic information file) format.

### 6MR (0,0)

```
data_6MR-0-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05156  0.33142  0.87617  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.44148  0.10094  0.31896  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16244  0.87309  0.09626  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.33300  0.90468  0.09808  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.05771  0.65993  0.88840  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05690  0.88992  0.65904  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.33020  0.13738  0.88357  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.15950  0.10242  0.87257  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05596  0.87797  0.32992  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43458  0.32619  0.10377  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55413  0.32669  0.88318  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.94467  0.10617  0.33482  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.67047  0.88114  0.12407  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.83583  0.89128  0.12407  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.94318  0.11350  0.66457  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.57133  0.67371  0.89503  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94559  0.66354  0.11637  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.55949  0.89890  0.68644  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.83311  0.11837  0.89582  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66696  0.11373  0.90236  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55174  0.88523  0.33775  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.94125  0.33341  0.10778  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.45035  0.12162  0.66983  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.45381  0.67162  0.12444  0.00000  Uiso  1.00
O26  O  0.01587  0.33114  0.02918  0.00000  Uiso  1.00
O27  O  0.02109  0.03268  0.33025  0.00000  Uiso  1.00
O28  O  0.14586  0.01525  0.01382  0.00000  Uiso  1.00
O29  O  0.34645  0.97337  0.93979  0.00000  Uiso  1.00
O30  O  0.47983  0.94891  0.73759  0.00000  Uiso  1.00
O31  O  0.49674  0.72117  0.96437  0.00000  Uiso  1.00
O32  O  0.07043  0.49504  0.83611  0.00000  Uiso  1.00
O33  O  0.43440  0.10120  0.48652  0.00000  Uiso  1.00
O34  O  0.24921  0.85997  0.11334  0.00000  Uiso  1.00
O35  O  0.42742  0.49472  0.12303  0.00000  Uiso  1.00
O36  O  0.07271  0.83972  0.49497  0.00000  Uiso  1.00
O37  O  0.24401  0.13375  0.85451  0.00000  Uiso  1.00
O38  O  0.12656  0.25657  0.89345  0.00000  Uiso  1.00
O39  O  0.44644  0.25983  0.25913  0.00000  Uiso  1.00
O40  O  0.13167  0.88881  0.25396  0.00000  Uiso  1.00
```

O41	O	0.37996	0.76800	0.06328	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37024	0.15053	0.74251	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05355	0.74809	0.74691	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.51912	0.25438	0.72908	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36789	0.00993	0.23400	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12537	0.72736	0.00265	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00067	0.74940	0.24506	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12244	0.00744	0.72783	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.35788	0.25134	0.02024	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.50135	0.28769	0.00897	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51289	0.02167	0.27502	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.66423	0.03239	0.05031	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83893	0.97023	0.97525	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98031	0.96119	0.66592	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98245	0.66610	0.96407	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57054	0.50154	0.88253	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92621	0.14914	0.49881	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75437	0.85836	0.16650	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92634	0.49896	0.15364	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.56284	0.90270	0.51455	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74953	0.14773	0.86357	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63195	0.26565	0.92636	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95081	0.25283	0.25412	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63032	0.88468	0.27177	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87076	0.73880	0.10075	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86895	0.09950	0.74314	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56952	0.73738	0.73712	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99750	0.24491	0.74716	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88009	0.99279	0.25706	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63859	0.74651	0.00597	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50225	0.73865	0.28290	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62409	0.01012	0.76817	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87451	0.25495	0.99865	0.00000	Uiso	1.00
Cu74	Cu	0.43173	0.85975	0.89800	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (1,0)

```

data_6MR-1-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05145  0.33511  0.88184  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.44364  0.10145  0.32380  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16472  0.87717  0.10416  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.33352  0.90138  0.10032  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.05900  0.66421  0.89485  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05795  0.89323  0.66639  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.33017  0.13855  0.88846  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16145  0.10714  0.87911  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05604  0.88041  0.33638  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43569  0.32771  0.10875  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55445  0.32636  0.88797  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.94418  0.10859  0.34027  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.67080  0.87909  0.12662  0.00000  Uiso  1.00

```

Si15	Si	0.83586	0.89301	0.12951	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.94392	0.11800	0.67071	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.57138	0.67343	0.89856	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94655	0.66595	0.12350	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.56078	0.89752	0.68957	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.83327	0.12011	0.90183	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.66745	0.11287	0.90679	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.55222	0.88856	0.34178	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.94093	0.33555	0.11379	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.45132	0.12019	0.67384	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.45268	0.67495	0.12536	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01507	0.33300	0.03387	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.02025	0.03399	0.33496	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.15224	0.02189	0.02308	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.34153	0.97486	0.94532	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48127	0.94826	0.73740	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.49743	0.72305	0.96823	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07211	0.49905	0.84462	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43301	0.09973	0.49047	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.25078	0.85974	0.12972	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.43065	0.49683	0.13071	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07391	0.84489	0.50196	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24465	0.14676	0.85468	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12550	0.25786	0.89959	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.44491	0.26030	0.26415	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.13127	0.89227	0.25929	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.37630	0.76033	0.05632	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37067	0.14383	0.74659	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05301	0.74965	0.75158	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.51870	0.25524	0.73369	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37410	0.00085	0.23544	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12715	0.73441	0.00627	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00124	0.74948	0.25426	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12445	0.00714	0.73735	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.35934	0.25521	0.02223	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.50266	0.28749	0.01528	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51918	0.03416	0.28741	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.66522	0.03177	0.05503	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83857	0.97131	0.98031	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98221	0.96719	0.67410	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98428	0.67013	0.97238	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57038	0.50110	0.88653	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92592	0.15079	0.50447	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75457	0.85674	0.17124	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92625	0.50125	0.15886	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.56568	0.89957	0.51805	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74980	0.14888	0.86757	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63214	0.26453	0.92964	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95121	0.25582	0.26059	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62941	0.87776	0.27237	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87217	0.74220	0.10712	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87008	0.10274	0.75021	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56928	0.73507	0.73953	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99747	0.25210	0.75052	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87906	0.99676	0.26212	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63984	0.74577	0.00649	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49643	0.75080	0.28586	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62527	0.00795	0.77282	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87380	0.25632	0.00639	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.34873	0.74184	0.69881	0.00000	Uiso	1.00
Cu75	Cu	0.42469	0.84141	0.88086	0.00000	Uiso	1.00
H76	H	0.34068	0.81259	0.62910	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.36593	0.65979	0.64438	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (2,0)

```

data_6MR-2-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_

```

```

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z
_cell_length_a      18.6712
_cell_length_b      9.3357
_cell_length_c      9.3358
_cell_angle_alpha   94.7613
_cell_angle_beta    94.7629
_cell_angle_gamma   94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2 Si  0.06056  0.32363  0.88197  0.00000  Uiso  1.00
Si3 Si  0.45092  0.07666  0.31102  0.00000  Uiso  1.00
Si4 Si  0.17419  0.87175  0.11611  0.00000  Uiso  1.00
Si5 Si  0.33342  0.86101  0.10623  0.00000  Uiso  1.00
Si6 Si  0.06777  0.65789  0.90168  0.00000  Uiso  1.00
Si7 Si  0.06650  0.88285  0.67465  0.00000  Uiso  1.00
Si8 Si  0.33453  0.08165  0.87812  0.00000  Uiso  1.00
Si9 Si  0.17477  0.09785  0.88677  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05896  0.86339  0.34211  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.44996  0.29378  0.08929  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55959  0.29483  0.87176  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.94198  0.09064  0.33638  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.67156  0.85122  0.09165  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.84286  0.88121  0.12140  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.95523  0.11504  0.66812  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.57039  0.63967  0.87468  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.95546  0.65115  0.13386  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.57604  0.86019  0.65393  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.84397  0.10501  0.89907  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.67290  0.07932  0.86654  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.56031  0.86049  0.31024  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.94398  0.31862  0.10868  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.45160  0.07585  0.65748  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.45147  0.64388  0.08808  0.00000  Uiso  1.00
O26 O  0.01653  0.30941  0.02412  0.00000  Uiso  1.00
O27 O  0.01361  0.00346  0.32813  0.00000  Uiso  1.00
O28 O  0.17491  0.02203  0.03840  0.00000  Uiso  1.00
O29 O  0.31953  0.92991  0.95229  0.00000  Uiso  1.00
O30 O  0.49714  0.91274  0.69939  0.00000  Uiso  1.00
O31 O  0.49023  0.68722  0.91992  0.00000  Uiso  1.00
O32 O  0.08330  0.49165  0.86088  0.00000  Uiso  1.00
O33 O  0.43498  0.08113  0.47585  0.00000  Uiso  1.00
O34 O  0.25525  0.83628  0.17099  0.00000  Uiso  1.00
O35 O  0.43893  0.46169  0.09670  0.00000  Uiso  1.00
O36 O  0.08362  0.84263  0.50924  0.00000  Uiso  1.00
O37 O  0.25579  0.14321  0.84585  0.00000  Uiso  1.00
O38 O  0.13379  0.24381  0.90443  0.00000  Uiso  1.00
O39 O  0.45043  0.23492  0.24943  0.00000  Uiso  1.00
O40 O  0.13061  0.88829  0.25823  0.00000  Uiso  1.00
O41 O  0.36486  0.70648  0.06527  0.00000  Uiso  1.00
O42 O  0.37102  0.03718  0.73274  0.00000  Uiso  1.00
O43 O  0.05604  0.73443  0.75265  0.00000  Uiso  1.00
O44 O  0.50761  0.22101  0.73607  0.00000  Uiso  1.00
O45 O  0.38905  0.96463  0.21682  0.00000  Uiso  1.00
O46 O  0.13721  0.73856  0.00243  0.00000  Uiso  1.00
O47 O  0.01002  0.71819  0.27251  0.00000  Uiso  1.00
O48 O  0.13428  0.98620  0.75623  0.00000  Uiso  1.00
O49 O  0.38422  0.20119  0.98590  0.00000  Uiso  1.00
O50 O  0.52679  0.26384  0.02416  0.00000  Uiso  1.00
O51 O  0.52989  0.01668  0.28922  0.00000  Uiso  1.00
O52 O  0.65531  0.99172  0.00553  0.00000  Uiso  1.00
O53 O  0.86175  0.96080  0.97811  0.00000  Uiso  1.00
O54 O  0.99281  0.96424  0.67765  0.00000  Uiso  1.00
O55 O  0.99499  0.66455  0.98567  0.00000  Uiso  1.00
O56 O  0.57151  0.46792  0.85672  0.00000  Uiso  1.00
O57 O  0.93124  0.14126  0.50253  0.00000  Uiso  1.00
O58 O  0.75728  0.83820  0.11852  0.00000  Uiso  1.00
O59 O  0.93205  0.48465  0.15697  0.00000  Uiso  1.00

```



O60	O	0.57360	0.83524	0.48144	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75872	0.10815	0.85874	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63922	0.23318	0.87700	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95386	0.23412	0.25228	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63904	0.86317	0.24692	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88293	0.73427	0.12207	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88270	0.10359	0.75081	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.58334	0.70532	0.72068	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01097	0.25085	0.73848	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87041	0.98893	0.26573	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63395	0.70550	-0.00270	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50307	0.73059	0.23793	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64024	0.98102	0.71821	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87318	0.24878	0.00528	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.40483	0.69805	0.52638	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.34147	0.65010	0.78970	0.00000	Uiso	1.00
Cu76	Cu	0.42880	0.76227	0.74803	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.44141	0.72498	0.46102	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.39164	0.59477	0.50353	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.29949	0.69821	0.75564	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.34276	0.66101	0.90127	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (3,0)

```

data_6MR-3-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05092  0.34146  0.87379  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.44022  0.10454  0.33889  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16927  0.88471  0.10604  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.33407  0.90226  0.13050  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.06522  0.67440  0.89231  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.06544  0.90163  0.66878  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.33275  0.13920  0.89708  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16829  0.11343  0.88152  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05212  0.88090  0.33335  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.44013  0.34149  0.10668  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55537  0.33359  0.89111  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93823  0.10760  0.32777  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66804  0.88000  0.10531  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.83302  0.89441  0.11517  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.94825  0.13117  0.66379  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.56268  0.66547  0.88739  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94890  0.67064  0.12408  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56572  0.89592  0.65986  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.83298  0.12451  0.88710  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66819  0.11518  0.87649  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55998  0.89732  0.33445  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93821  0.33714  0.10187  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.44435  0.11135  0.66731  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.44866  0.67279  0.12282  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.01302  0.33141  0.02369  0.00000  Uiso  1.00

```

O27	O	0.01280	0.02885	0.31778	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.16680	0.03773	0.03298	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33172	0.01852	0.01163	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48331	0.94281	0.65942	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48100	0.67417	0.94440	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07847	0.50699	0.85116	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42256	0.16249	0.49653	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.25105	0.85496	0.16028	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42319	0.50071	0.16298	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07794	0.86294	0.50072	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24967	0.17573	0.85683	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12035	0.24917	0.88444	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.43339	0.22840	0.22733	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.12284	0.88934	0.24427	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.37130	0.76202	0.06061	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36425	0.07274	0.75265	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05120	0.75222	0.74426	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50136	0.24329	0.76875	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.38036	0.96730	0.27827	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.13801	0.75342	0.98460	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	-0.00295	0.74134	0.27047	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.13863	-0.00703	0.74798	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37745	0.28833	0.96999	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51965	0.34170	0.04611	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.52112	0.04837	0.33958	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.66817	0.02052	0.01444	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83639	0.97777	0.96920	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.99607	0.99427	0.68271	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	-0.00411	0.68496	0.98543	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57563	0.49841	0.84887	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92613	0.14913	0.49544	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75072	0.84096	0.14011	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92473	0.50373	0.14512	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58579	0.85804	0.49680	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75077	0.15405	0.83909	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63244	0.26385	0.91424	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94619	0.25515	0.24801	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63418	0.91949	0.25525	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87699	0.75266	0.09591	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87522	0.10406	0.74282	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56745	0.74690	0.74092	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.00488	0.27876	0.73540	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86946	0.00102	0.25406	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62207	0.74071	0.01404	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50618	0.76823	0.25310	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62435	0.02149	0.73786	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87070	0.26243	0.99304	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.31230	0.51557	0.85256	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.30012	0.80389	0.75381	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.41152	0.68991	0.64655	0.00000	Uiso	1.00
Cu77	Cu	0.38453	0.71302	0.84812	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.28741	0.46913	0.76289	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.33208	0.43731	0.90442	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.31875	0.90561	0.73725	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.25882	0.81084	0.81089	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.44844	0.62300	0.63185	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.43672	0.79028	0.63659	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (4,0)

```

data_6MR-4-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a             18.6712
_cell_length_b             9.3357
_cell_length_c             9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613

```

_cell_angle_beta	94.7629					
_cell_angle_gamma	94.7613					
loop_						
_atom_site_label						
_atom_site_type_symbol						
_atom_site_fract_x						
_atom_site_fract_y						
_atom_site_fract_z						
_atom_site_U_iso_or_equiv						
_atom_site_adp_type						
_atom_site_occupancy						
Si2	Si	0.05510	0.33165	0.88499	0.00000	Uiso 1.00
Si3	Si	0.44447	0.09655	0.33732	0.00000	Uiso 1.00
Si4	Si	0.17050	0.88165	0.12071	0.00000	Uiso 1.00
Si5	Si	0.33308	0.88582	0.13387	0.00000	Uiso 1.00
Si6	Si	0.06621	0.66444	0.90733	0.00000	Uiso 1.00
Si7	Si	0.06944	0.88977	0.68031	0.00000	Uiso 1.00
Si8	Si	0.33569	0.11375	0.89677	0.00000	Uiso 1.00
Si9	Si	0.17338	0.10295	0.88704	0.00000	Uiso 1.00
Si10	Si	0.05464	0.86530	0.34500	0.00000	Uiso 1.00
Si11	Si	0.44539	0.32546	0.10663	0.00000	Uiso 1.00
Si12	Si	0.56177	0.31546	0.90063	0.00000	Uiso 1.00
Si13	Si	0.93760	0.09507	0.34169	0.00000	Uiso 1.00
Si14	Si	0.67067	0.86001	0.10954	0.00000	Uiso 1.00
Si15	Si	0.83604	0.88201	0.13249	0.00000	Uiso 1.00
Si16	Si	0.95275	0.12283	0.67713	0.00000	Uiso 1.00
Si17	Si	0.56791	0.65135	0.88769	0.00000	Uiso 1.00
Si18	Si	0.95324	0.65409	0.13805	0.00000	Uiso 1.00
Si19	Si	0.57286	0.87849	0.66879	0.00000	Uiso 1.00
Si20	Si	0.83938	0.10480	0.90107	0.00000	Uiso 1.00
Si21	Si	0.67413	0.09764	0.88281	0.00000	Uiso 1.00
Si22	Si	0.55821	0.88218	0.32891	0.00000	Uiso 1.00
Si23	Si	0.94371	0.32146	0.11457	0.00000	Uiso 1.00
Al24	Al	0.44914	0.09274	0.67826	0.00000	Uiso 1.00
Al25	Al	0.44872	0.66762	0.10391	0.00000	Uiso 1.00
O26	O	0.01884	0.31845	0.03689	0.00000	Uiso 1.00
O27	O	0.00649	0.00086	0.32978	0.00000	Uiso 1.00
O28	O	0.16892	0.03031	0.03954	0.00000	Uiso 1.00
O29	O	0.32540	0.98339	0.99937	0.00000	Uiso 1.00
O30	O	0.49027	0.92081	0.69877	0.00000	Uiso 1.00
O31	O	0.48503	0.68047	0.92758	0.00000	Uiso 1.00
O32	O	0.08263	0.49833	0.86703	0.00000	Uiso 1.00
O33	O	0.43487	0.13285	0.50393	0.00000	Uiso 1.00
O34	O	0.25119	0.85092	0.18032	0.00000	Uiso 1.00
O35	O	0.43203	0.49067	0.13961	0.00000	Uiso 1.00
O36	O	0.07999	0.84729	0.51244	0.00000	Uiso 1.00
O37	O	0.25427	0.16339	0.85957	0.00000	Uiso 1.00
O38	O	0.12334	0.23585	0.88443	0.00000	Uiso 1.00
O39	O	0.43821	0.23827	0.24951	0.00000	Uiso 1.00
O40	O	0.12551	0.89800	0.26101	0.00000	Uiso 1.00
O41	O	0.36441	0.73688	0.07781	0.00000	Uiso 1.00
O42	O	0.36812	0.05125	0.75176	0.00000	Uiso 1.00
O43	O	0.05402	0.74356	0.75943	0.00000	Uiso 1.00
O44	O	0.50944	0.21771	0.77978	0.00000	Uiso 1.00
O45	O	0.38202	-0.03172	0.27238	0.00000	Uiso 1.00
O46	O	0.13530	0.74593	0.00824	0.00000	Uiso 1.00
O47	O	0.00908	0.71543	0.27732	0.00000	Uiso 1.00
O48	O	0.14544	0.97745	0.75399	0.00000	Uiso 1.00
O49	O	0.38574	0.25127	-0.02234	0.00000	Uiso 1.00
O50	O	0.52726	0.31264	0.05600	0.00000	Uiso 1.00
O51	O	0.52476	0.03879	0.31847	0.00000	Uiso 1.00
O52	O	0.67107	0.00126	0.01930	0.00000	Uiso 1.00
O53	O	0.84294	0.95738	0.98223	0.00000	Uiso 1.00
O54	O	0.00365	0.99081	0.69551	0.00000	Uiso 1.00
O55	O	0.99294	0.66905	0.99013	0.00000	Uiso 1.00
O56	O	0.57564	0.48078	0.85783	0.00000	Uiso 1.00
O57	O	0.92857	0.14099	0.50976	0.00000	Uiso 1.00
O58	O	0.75333	0.82341	0.14802	0.00000	Uiso 1.00
O59	O	0.92728	0.48704	0.15564	0.00000	Uiso 1.00
O60	O	0.57714	0.85306	0.49748	0.00000	Uiso 1.00
O61	O	0.75738	0.13416	0.85116	0.00000	Uiso 1.00
O62	O	0.64006	0.24896	0.91857	0.00000	Uiso 1.00
O63	O	0.95238	0.24089	0.26151	0.00000	Uiso 1.00
O64	O	0.63514	0.89434	0.25909	0.00000	Uiso 1.00
O65	O	0.88321	0.74437	0.13082	0.00000	Uiso 1.00

O66	O	0.88082	0.08516	0.75628	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.58261	0.72676	0.73955	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99629	0.27344	0.74940	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86473	-0.00018	0.26869	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62693	0.71888	0.01830	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50160	0.75400	0.25342	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63195	0.00693	0.73888	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87672	0.24268	0.00684	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.34645	0.81738	0.62076	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.50625	-0.34534	-0.36420	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.41222	0.64402	0.44261	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.37597	0.55236	0.68054	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.43982	0.70972	0.66762	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.31928	0.89424	0.66226	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.37490	0.86196	0.55054	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.51810	-0.35219	-0.46415	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.54751	-0.38101	-0.31080	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.44802	0.66730	0.37441	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.39784	0.54076	0.42291	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.33488	0.60000	0.62770	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.37405	0.57017	0.78864	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (5,0)

```

data_6MR-5-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si1  Si  0.05058  0.33458  0.88560  0.00000  Uiso  1.00
Si2  Si  0.44065  0.10153  0.31305  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.17019  0.87601  0.11213  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.32016  0.89197  0.10448  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.06078  0.66263  0.89837  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.06151  0.88893  0.67484  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.32417  0.12659  0.88111  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.16572  0.10504  0.88687  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.05700  0.87771  0.34076  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.43489  0.32827  0.09818  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.55716  0.32503  0.87249  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.94348  0.10491  0.34181  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.67271  0.86901  0.11036  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.83601  0.89084  0.13090  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.94778  0.12217  0.67494  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.57530  0.66278  0.88641  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.94841  0.66266  0.13062  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.56423  0.88872  0.67251  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.83362  0.11843  0.90289  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.66921  0.10329  0.89322  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.55114  0.87270  0.32910  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.93797  0.33387  0.11774  0.00000  Uiso  1.00
Al23 Al  0.44838  0.11241  0.66134  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.45164  0.66678  0.11389  0.00000  Uiso  1.00
O25  O   0.01046  0.33278  0.03304  0.00000  Uiso  1.00

```

O26	O	0.01868	0.02802	0.33322	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.17123	0.02899	0.03880	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.30928	0.98603	0.95598	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.48286	0.93968	0.70332	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.50372	0.69379	0.96678	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.07953	0.49809	0.85870	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.43014	0.10723	0.47915	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.25278	0.83381	0.14899	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.41909	0.49209	0.12150	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.07687	0.84948	0.50813	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.24314	0.17216	0.84328	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.11808	0.23974	0.90658	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.45164	0.25841	0.25074	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.13130	0.89125	0.26131	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.38394	0.77689	0.05001	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36864	0.10841	0.74346	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.04845	0.73908	0.74943	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.51434	0.24724	0.72781	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.36981	0.01180	0.22231	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.12823	0.74740	0.00092	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.00324	0.74200	0.26377	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.13179	-0.01442	0.75679	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.36467	0.23673	0.01024	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.50573	0.30276	0.00677	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51416	0.01917	0.27843	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.67089	0.02397	0.04233	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.83692	0.96951	0.98168	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.99063	0.97784	0.68682	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98745	0.66269	0.98088	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.58249	0.49238	0.85833	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.92683	0.14448	0.50721	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.75476	0.84736	0.17026	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.92382	0.49941	0.16544	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.57311	0.88912	0.50198	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.75104	0.14539	0.85418	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.63037	0.25022	0.91851	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.95088	0.25296	0.26334	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.62418	0.86727	0.24612	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.87608	0.74471	0.10990	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87541	0.10220	0.75778	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.56866	0.72904	0.72875	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	-0.00282	0.26627	0.74610	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.87652	0.99710	0.26456	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.64665	0.73890	-0.01507	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.49441	0.73598	0.27996	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.62775	-0.00087	0.75842	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.86959	0.25480	0.01322	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.32302	0.64557	0.70686	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.46875	-0.10460	-0.03870	0.00000	Uiso	1.00
Cu75	Cu	0.40407	0.74944	0.83951	0.00000	Uiso	1.00
H76	H	0.28205	0.69329	0.74333	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.32760	0.67490	0.60947	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.46642	0.00010	-0.04997	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.47555	-0.10867	0.06925	0.00000	Uiso	1.00
O80	O	0.44016	0.74118	0.66732	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.39892	0.72383	0.59800	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.46548	0.64812	0.59842	0.00000	Uiso	1.00
O83	O	0.42011	0.58890	0.82077	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.44542	0.49475	0.77649	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	1.41138	0.53764	0.89490	0.00000	Uiso	1.00
O86	O	1.33215	0.81911	0.87497	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	1.29813	0.77286	0.92510	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.30984	0.78414	0.77089	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (6,0)

```

data_6MR-6-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_

```

```

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z
_cell_length_a      18.6712
_cell_length_b      9.3357
_cell_length_c      9.3358
_cell_angle_alpha   94.7613
_cell_angle_beta    94.7629
_cell_angle_gamma   94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2 Si  0.06719  0.34464  0.88657  0.00000  Uiso  1.00
Si3 Si  0.46048  0.10755  0.32719  0.00000  Uiso  1.00
Si4 Si  0.18231  0.89063  0.11391  0.00000  Uiso  1.00
Si5 Si  0.34912  0.89442  0.10914  0.00000  Uiso  1.00
Si6 Si  0.07702  0.67749  0.90369  0.00000  Uiso  1.00
Si7 Si  0.07386  0.90464  0.67364  0.00000  Uiso  1.00
Si8 Si  0.34556  0.12922  0.89692  0.00000  Uiso  1.00
Si9 Si  0.17910  0.11871  0.88597  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.06902  0.89017  0.34361  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.45260  0.33308  0.10526  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.57052  0.34235  0.87081  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.95617  0.11821  0.34448  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.68423  0.88307  0.11842  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.84911  0.90299  0.13202  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.95999  0.13003  0.67482  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.58331  0.67131  0.90301  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.96191  0.67747  0.13054  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.57557  0.89986  0.67531  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.84634  0.13133  0.90408  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.68031  0.11519  0.89748  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.56972  0.87837  0.35180  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.95355  0.34422  0.11583  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.46248  0.13248  0.65549  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.45954  0.66571  0.13314  0.00000  Uiso  1.00
O26 O  0.02712  0.33698  0.03415  0.00000  Uiso  1.00
O27 O  0.03182  0.04203  0.34204  0.00000  Uiso  1.00
O28 O  0.17150  0.03545  0.03117  0.00000  Uiso  1.00
O29 O  0.34821  0.96981  0.95576  0.00000  Uiso  1.00
O30 O  0.49693  0.96301  0.66360  0.00000  Uiso  1.00
O31 O  0.50964  0.67624  0.98225  0.00000  Uiso  1.00
O32 O  0.08818  0.51058  0.85493  0.00000  Uiso  1.00
O33 O  0.43237  0.16721  0.47907  0.00000  Uiso  1.00
O34 O  0.26659  0.87561  0.15701  0.00000  Uiso  1.00
O35 O  0.43672  0.49003  0.17442  0.00000  Uiso  1.00
O36 O  0.09072  0.85633  0.50915  0.00000  Uiso  1.00
O37 O  0.26169  0.15843  0.85498  0.00000  Uiso  1.00
O38 O  0.14174  0.26880  0.90606  0.00000  Uiso  1.00
O39 O  0.48066  0.24291  0.23619  0.00000  Uiso  1.00
O40 O  0.14219  0.90310  0.26189  0.00000  Uiso  1.00
O41 O  0.37960  0.73993  0.08441  0.00000  Uiso  1.00
O42 O  0.38674  0.14763  0.75318  0.00000  Uiso  1.00
O43 O  0.06925  0.75963  0.75759  0.00000  Uiso  1.00
O44 O  0.53042  0.27009  0.71860  0.00000  Uiso  1.00
O45 O  0.39787  0.99667  0.23669  0.00000  Uiso  1.00
O46 O  0.14680  0.74867  0.00977  0.00000  Uiso  1.00
O47 O  0.01360  0.75652  0.26826  0.00000  Uiso  1.00
O48 O  0.13991  0.01828  0.74590  0.00000  Uiso  1.00
O49 O  0.37753  0.25185  0.02521  0.00000  Uiso  1.00
O50 O  0.51462  0.34226  0.99451  0.00000  Uiso  1.00
O51 O  0.53567  0.03348  0.35596  0.00000  Uiso  1.00
O52 O  0.68022  0.03517  0.04602  0.00000  Uiso  1.00
O53 O  0.85119  0.98312  0.98372  0.00000  Uiso  1.00
O54 O  0.99789  0.97842  0.67769  0.00000  Uiso  1.00
O55 O  0.00345  0.68719  0.98445  0.00000  Uiso  1.00
O56 O  0.60032  0.50823  0.85231  0.00000  Uiso  1.00
O57 O  0.93898  0.16179  0.50912  0.00000  Uiso  1.00
O58 O  0.76748  0.86184  0.17015  0.00000  Uiso  1.00
O59 O  0.94084  0.51121  0.15980  0.00000  Uiso  1.00

```

O60	O	0.59978	0.85256	0.51577	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76287	0.15719	0.86115	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.64059	0.26116	0.92310	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.96390	0.26443	0.26283	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63846	0.88306	0.25702	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88799	0.75495	0.10964	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88718	0.11581	0.75740	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.57011	0.74921	0.75341	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01527	0.26403	0.75031	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.89035	0.00754	0.26664	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.65380	0.74967	0.00042	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50707	0.75234	0.29079	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63861	0.01136	0.76299	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88446	0.26836	0.01114	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.24786	0.63124	0.58827	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.50897	0.50701	0.56717	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.37367	0.42545	0.41670	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.34054	0.41165	0.70066	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.40269	0.69318	0.77214	0.00000	Uiso	1.00
O79	O	0.41152	0.73761	0.49312	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.39789	0.55602	0.59616	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.26999	0.68432	0.51502	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.19732	0.65111	0.57874	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.54403	0.58440	0.61378	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.52219	0.41771	0.60952	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.39876	0.45878	0.33222	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.39368	0.33225	0.43752	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.29001	0.40974	0.66272	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.35373	0.30993	0.70393	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.35984	0.68462	0.82565	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.44435	0.69041	0.84716	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.43286	0.81769	0.56544	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.44657	0.73440	0.41683	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (0,1)

```

data_6MR-0-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05469  0.34114  0.87610  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.44427  0.11289  0.32148  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16189  0.88667  0.10200  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.33440  0.90243  0.11166  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.06163  0.67079  0.89433  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.06055  0.90081  0.66416  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.33337  0.12152  0.89319  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16098  0.10916  0.87979  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05520  0.88221  0.33477  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.44194  0.32948  0.10370  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55569  0.33715  0.88620  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.94360  0.11245  0.33350  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.67033  0.89557  0.11900  0.00000  Uiso  1.00

```

Si15	Si	0.83664	0.89937	0.12040	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.94672	0.12542	0.66423	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.56452	0.68465	0.89820	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94737	0.67043	0.11993	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.56279	0.90374	0.68027	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.83578	0.12622	0.89338	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.66936	0.12372	0.89377	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.55587	0.89462	0.33342	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.94274	0.33979	0.10616	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.44888	0.12954	0.67103	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44950	0.67975	0.12457	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01739	0.33726	0.02730	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.01848	0.03418	0.33019	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.13769	0.02330	0.01678	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.34893	0.95884	0.94873	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48269	0.95698	0.72255	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48696	0.73181	0.95689	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07455	0.50613	0.84062	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43464	0.11816	0.48856	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24832	0.88968	0.12497	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.43310	0.49724	0.10775	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07451	0.84758	0.50004	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24708	0.13202	0.87901	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12997	0.26629	0.89201	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.44981	0.27314	0.26421	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.13022	0.89584	0.25854	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36483	0.74708	0.11086	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36597	0.12659	0.74151	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05690	0.75985	0.75339	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.51164	0.27025	0.73774	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37277	0.02004	0.23520	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.13028	0.73649	0.00702	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00103	0.74964	0.25428	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12784	0.01614	0.73006	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.36865	0.24510	0.01550	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51300	0.28893	0.02295	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51681	0.03515	0.28400	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.66600	0.04701	0.04428	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84304	0.97812	0.97209	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98472	0.97453	0.67010	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98662	0.67697	0.97059	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56760	0.51300	0.88909	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92750	0.15778	0.49832	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75367	0.86217	0.15056	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92700	0.50474	0.15168	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.56796	0.89913	0.50941	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75231	0.15339	0.85665	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63562	0.27779	0.90691	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95245	0.25830	0.25193	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63549	0.90528	0.27210	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87355	0.74864	0.10286	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87267	0.11048	0.74227	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56726	0.74331	0.73773	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00106	0.25876	0.74374	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87669	0.00335	0.25694	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63016	0.76253	0.00908	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50865	0.74827	0.26953	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62654	0.01590	0.76232	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87549	0.26303	-0.00221	0.00000	Uiso	1.00
Cu74	Cu	0.42038	0.82669	0.81934	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.34610	0.66208	0.80630	0.00000	Uiso	1.00
H76	H	0.29901	0.67893	0.74782	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.36384	0.56760	0.76422	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.33544	0.65079	0.91237	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (1,1)

```

data_6MR-1-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number      1
_symmetry_cell_setting      triclinic

```



```

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a      18.6712
_cell_length_b      9.3357
_cell_length_c      9.3358
_cell_angle_alpha   94.7613
_cell_angle_beta    94.7629
_cell_angle_gamma   94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2 Si 0.06013 0.36432 0.88065 0.00000 Uiso 1.00
Si3 Si 0.45223 0.11846 0.31460 0.00000 Uiso 1.00
Si4 Si 0.17375 0.91001 0.11618 0.00000 Uiso 1.00
Si5 Si 0.33649 0.90384 0.10648 0.00000 Uiso 1.00
Si6 Si 0.06812 0.69667 0.90248 0.00000 Uiso 1.00
Si7 Si 0.06792 0.92397 0.67527 0.00000 Uiso 1.00
Si8 Si 0.33644 0.12773 0.88345 0.00000 Uiso 1.00
Si9 Si 0.17368 0.13802 0.88910 0.00000 Uiso 1.00
Si10 Si 0.06003 0.90255 0.34346 0.00000 Uiso 1.00
Si11 Si 0.45273 0.33683 0.09633 0.00000 Uiso 1.00
Si12 Si 0.56261 0.34073 0.88043 0.00000 Uiso 1.00
Si13 Si 0.94402 0.12934 0.33683 0.00000 Uiso 1.00
Si14 Si 0.67326 0.89878 0.10100 0.00000 Uiso 1.00
Si15 Si 0.84381 0.91995 0.12200 0.00000 Uiso 1.00
Si16 Si 0.95564 0.15485 0.66775 0.00000 Uiso 1.00
Si17 Si 0.57114 0.68543 0.88101 0.00000 Uiso 1.00
Si18 Si 0.95523 0.68971 0.13324 0.00000 Uiso 1.00
Si19 Si 0.57172 0.90337 0.66174 0.00000 Uiso 1.00
Si20 Si 0.84376 0.14505 0.89866 0.00000 Uiso 1.00
Si21 Si 0.67337 0.12363 0.87454 0.00000 Uiso 1.00
Si22 Si 0.56255 0.90266 0.31667 0.00000 Uiso 1.00
Si23 Si 0.94360 0.35811 0.10821 0.00000 Uiso 1.00
Al24 Al 0.45488 0.12194 0.66467 0.00000 Uiso 1.00
Al25 Al 0.45374 0.68655 0.09744 0.00000 Uiso 1.00
O26 O 0.01592 0.35090 0.02243 0.00000 Uiso 1.00
O27 O 0.01720 0.04631 0.33164 0.00000 Uiso 1.00
O28 O 0.16955 0.05912 0.03773 0.00000 Uiso 1.00
O29 O 0.32915 0.96886 0.94748 0.00000 Uiso 1.00
O30 O 0.49183 0.95116 0.70795 0.00000 Uiso 1.00
O31 O 0.49064 0.72980 0.92626 0.00000 Uiso 1.00
O32 O 0.08372 0.53137 0.85750 0.00000 Uiso 1.00
O33 O 0.43847 0.11751 0.48114 0.00000 Uiso 1.00
O34 O 0.25637 0.88250 0.16362 0.00000 Uiso 1.00
O35 O 0.43960 0.50309 0.09625 0.00000 Uiso 1.00
O36 O 0.08388 0.87884 0.51024 0.00000 Uiso 1.00
O37 O 0.25644 0.18489 0.86043 0.00000 Uiso 1.00
O38 O 0.13340 0.28466 0.90442 0.00000 Uiso 1.00
O39 O 0.45269 0.27885 0.25673 0.00000 Uiso 1.00
O40 O 0.13269 0.92414 0.26182 0.00000 Uiso 1.00
O41 O 0.36829 0.74994 0.08215 0.00000 Uiso 1.00
O42 O 0.36843 0.10215 0.72822 0.00000 Uiso 1.00
O43 O 0.05758 0.77786 0.75645 0.00000 Uiso 1.00
O44 O 0.51006 0.26705 0.74466 0.00000 Uiso 1.00
O45 O 0.38653 0.01428 0.22240 0.00000 Uiso 1.00
O46 O 0.13720 0.77377 0.00636 0.00000 Uiso 1.00
O47 O 0.00927 0.76083 0.27113 0.00000 Uiso 1.00
O48 O 0.13639 0.02936 0.75282 0.00000 Uiso 1.00
O49 O 0.38729 0.24397 -0.00881 0.00000 Uiso 1.00
O50 O 0.52969 0.30688 0.03215 0.00000 Uiso 1.00
O51 O 0.52927 0.05477 0.28550 0.00000 Uiso 1.00
O52 O 0.65963 0.04350 0.01979 0.00000 Uiso 1.00
O53 O 0.86180 0.00225 -0.02018 0.00000 Uiso 1.00
O54 O -0.00577 0.00524 0.67797 0.00000 Uiso 1.00
O55 O 0.99490 0.70027 0.98495 0.00000 Uiso 1.00
O56 O 0.57411 0.51392 0.86739 0.00000 Uiso 1.00
O57 O 0.93183 0.18085 0.50208 0.00000 Uiso 1.00
O58 O 0.75850 0.87891 0.12355 0.00000 Uiso 1.00

```

O59	O	0.93243	0.52379	0.15986	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57338	0.88778	0.48994	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75865	0.14611	0.85524	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.64240	0.28044	0.88467	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95420	0.27140	0.25012	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.64279	0.91026	0.25823	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88239	0.77110	0.11732	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88351	0.14272	0.75139	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.58084	0.74665	0.72390	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01109	0.29145	0.73700	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87394	0.02333	0.26757	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63383	0.75759	0.00182	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51102	0.76739	0.23996	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63481	0.02383	0.73276	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87253	0.28965	0.00459	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.35093	0.84125	0.60046	0.00000	Uiso	1.00
Cu75	Cu	0.42431	0.79042	0.76234	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.35298	0.62826	0.79246	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.34365	0.94400	0.63939	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.30913	0.62247	0.71778	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.37411	0.53011	0.78986	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.33776	0.65179	0.89590	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.37293	0.85446	0.51005	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (2,1)

```

data_6MR-2-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05036  0.32517  0.88454  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43906  0.09642  0.35650  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16357  0.86974  0.12098  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.33230  0.88704  0.15238  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.06341  0.65795  0.90959  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.06384  0.88488  0.68303  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.33352  0.11820  0.91320  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16447  0.09556  0.89779  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04952  0.86067  0.35146  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.44230  0.32505  0.11956  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55887  0.32409  0.90869  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93805  0.09189  0.34284  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66928  0.87276  0.11964  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.83250  0.87745  0.12865  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.94751  0.11505  0.67515  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.56187  0.65695  0.90238  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94641  0.65206  0.13911  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56294  0.88091  0.67673  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.83221  0.10547  0.90083  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66910  0.10310  0.89440  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55936  0.87852  0.34877  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93709  0.31806  0.11512  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.44599  0.10694  0.68667  0.00000  Uiso  1.00

```

Al25	Al	0.44840	0.65739	0.13445	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01017	0.31144	0.03154	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.01225	0.01141	0.34086	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.15243	0.01909	0.04600	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.34240	0.97938	0.01096	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48044	0.93127	0.67155	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48342	0.67233	0.96557	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07573	0.49156	0.86349	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42648	0.15832	0.51569	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24731	0.85889	0.17422	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42630	0.48408	0.17680	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07642	0.83779	0.51683	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24892	0.14555	0.89017	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12183	0.23890	0.89751	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.43794	0.22161	0.24895	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.12016	0.86879	0.26296	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36814	0.73948	0.12623	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36243	0.07148	0.75927	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04989	0.73998	0.76477	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50585	0.23307	0.78479	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36894	0.97646	0.30306	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.13588	0.73151	0.00612	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	-0.00689	0.72403	0.28648	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.13597	-0.01765	0.75810	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37961	0.26146	0.99089	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.52259	0.32418	0.06225	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51449	0.02121	0.34644	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.67268	0.02132	0.04106	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83468	0.95663	-0.02013	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.99346	0.97553	0.69011	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.99354	0.66793	0.00139	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57696	0.49014	0.87117	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92241	0.13487	0.50832	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75042	0.82922	0.15985	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92328	0.48437	0.15866	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58609	0.85185	0.51450	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75025	0.13280	0.84606	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63656	0.25624	0.92623	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94849	0.23822	0.26198	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63190	0.90445	0.26735	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87388	0.73235	0.11052	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87607	0.08999	0.75909	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56007	0.72696	0.74766	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.00340	0.26069	0.74384	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87041	-0.01411	0.26418	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62550	0.74100	0.01511	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50894	0.73869	0.27606	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61985	0.00171	0.76704	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86772	0.24141	0.01200	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.31236	0.86739	0.54729	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.37458	0.75681	0.82037	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.41212	0.63179	0.46018	0.00000	Uiso	1.00
Cu77	Cu	0.39646	0.75713	0.62687	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.31603	0.95166	0.62237	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.36988	0.62086	0.38073	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.45748	0.66584	0.40899	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.41892	0.72577	0.87950	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.32539	0.90953	0.45744	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.35988	0.84274	0.87669	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.41925	0.52888	0.48751	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (3,1)

```

data_6MR-3-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712

```

_cell_length_b	9.3357								
_cell_length_c	9.3358								
_cell_angle_alpha	94.7613								
_cell_angle_beta	94.7629								
_cell_angle_gamma	94.7613								
loop_									
_atom_site_label									
_atom_site_type_symbol									
_atom_site_fract_x									
_atom_site_fract_y									
_atom_site_fract_z									
_atom_site_U_iso_or_equiv									
_atom_site_adp_type									
_atom_site_occupancy									
Si2	Si	0.05822	0.33465	0.90729	0.00000	Uiso	1.00		
Si3	Si	0.43840	0.08848	0.35246	0.00000	Uiso	1.00		
Si4	Si	0.16784	0.88007	0.13096	0.00000	Uiso	1.00		
Si5	Si	0.33268	0.87474	0.14546	0.00000	Uiso	1.00		
Si6	Si	0.06081	0.66637	0.91518	0.00000	Uiso	1.00		
Si7	Si	0.06024	0.89269	0.68917	0.00000	Uiso	1.00		
Si8	Si	0.33540	0.10615	0.90613	0.00000	Uiso	1.00		
Si9	Si	0.16985	0.10596	0.90150	0.00000	Uiso	1.00		
Si10	Si	0.05543	0.88458	0.35826	0.00000	Uiso	1.00		
Si11	Si	0.44158	0.31536	0.11114	0.00000	Uiso	1.00		
Si12	Si	0.55425	0.33248	0.89244	0.00000	Uiso	1.00		
Si13	Si	0.94217	0.11234	0.36105	0.00000	Uiso	1.00		
Si14	Si	0.66992	0.88821	0.12903	0.00000	Uiso	1.00		
Si15	Si	0.83645	0.90027	0.14696	0.00000	Uiso	1.00		
Si16	Si	0.94882	0.12276	0.69227	0.00000	Uiso	1.00		
Si17	Si	0.56898	0.66377	0.91346	0.00000	Uiso	1.00		
Si18	Si	0.94854	0.67095	0.14418	0.00000	Uiso	1.00		
Si19	Si	0.57455	0.88902	0.68617	0.00000	Uiso	1.00		
Si20	Si	0.83717	0.13015	0.91942	0.00000	Uiso	1.00		
Si21	Si	0.67172	0.10240	0.89500	0.00000	Uiso	1.00		
Si22	Si	0.55703	0.87350	0.35532	0.00000	Uiso	1.00		
Si23	Si	0.94469	0.33993	0.13327	0.00000	Uiso	1.00		
Al24	Al	0.45104	0.12062	0.68408	0.00000	Uiso	1.00		
Al25	Al	0.44918	0.65306	0.13716	0.00000	Uiso	1.00		
O26	O	0.02067	0.33148	0.05888	0.00000	Uiso	1.00		
O27	O	0.01686	0.03423	0.35387	0.00000	Uiso	1.00		
O28	O	0.16806	0.02925	0.05192	0.00000	Uiso	1.00		
O29	O	0.33738	0.97926	0.01538	0.00000	Uiso	1.00		
O30	O	0.50649	0.98104	0.70463	0.00000	Uiso	1.00		
O31	O	0.48973	0.66807	0.97336	0.00000	Uiso	1.00		
O32	O	0.07759	0.50081	0.87424	0.00000	Uiso	1.00		
O33	O	0.42080	0.15025	0.50937	0.00000	Uiso	1.00		
O34	O	0.24867	0.84060	0.17726	0.00000	Uiso	1.00		
O35	O	0.42802	0.47513	0.17429	0.00000	Uiso	1.00		
O36	O	0.07688	0.85195	0.52358	0.00000	Uiso	1.00		
O37	O	0.25224	0.13867	0.86254	0.00000	Uiso	1.00		
O38	O	0.13298	0.25720	0.92174	0.00000	Uiso	1.00		
O39	O	0.43721	0.20947	0.23916	0.00000	Uiso	1.00		
O40	O	0.12893	0.90295	0.27870	0.00000	Uiso	1.00		
O41	O	0.36706	0.72671	0.11242	0.00000	Uiso	1.00		
O42	O	0.37277	0.04987	0.76281	0.00000	Uiso	1.00		
O43	O	0.05267	0.74373	0.76639	0.00000	Uiso	1.00		
O44	O	0.49124	0.29007	0.76083	0.00000	Uiso	1.00		
O45	O	0.37247	0.95966	0.29754	0.00000	Uiso	1.00		
O46	O	0.12739	0.74667	0.02346	0.00000	Uiso	1.00		
O47	O	0.00272	0.74972	0.27810	0.00000	Uiso	1.00		
O48	O	0.12696	0.00072	0.76907	0.00000	Uiso	1.00		
O49	O	0.37826	0.25510	0.98261	0.00000	Uiso	1.00		
O50	O	0.52052	0.31384	0.04679	0.00000	Uiso	1.00		
O51	O	0.51623	0.02213	0.35685	0.00000	Uiso	1.00		
O52	O	0.66590	0.03755	0.05098	0.00000	Uiso	1.00		
O53	O	0.84267	0.98336	0.00116	0.00000	Uiso	1.00		
O54	O	0.98538	0.97000	0.69474	0.00000	Uiso	1.00		
O55	O	0.98614	0.67364	0.99274	0.00000	Uiso	1.00		
O56	O	0.58791	0.49810	0.88249	0.00000	Uiso	1.00		
O57	O	0.92919	0.15855	0.52740	0.00000	Uiso	1.00		
O58	O	0.75310	0.85881	0.17194	0.00000	Uiso	1.00		
O59	O	0.92955	0.50541	0.17806	0.00000	Uiso	1.00		
O60	O	0.58501	0.84342	0.51906	0.00000	Uiso	1.00		
O61	O	0.75459	0.16432	0.88185	0.00000	Uiso	1.00		
O62	O	0.62094	0.23287	0.88131	0.00000	Uiso	1.00		

O63	O	0.95030	0.25823	0.27939	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63003	0.90279	0.27461	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87527	0.75148	0.12822	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87461	0.10848	0.76951	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56244	0.73200	0.75622	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00435	0.25307	0.77451	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87455	0.00320	0.28665	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63303	0.75208	0.02011	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50434	0.73909	0.28174	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64896	0.97434	0.76595	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87826	0.26721	0.02089	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.33162	0.83243	0.53387	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.46269	0.52801	0.61007	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.39485	0.74819	0.78124	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.34312	0.54089	0.40721	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.38422	0.66108	0.58433	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.33632	0.91265	0.61260	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.30580	0.59135	0.34702	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.38145	0.50994	0.33780	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.46375	0.43802	0.66209	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.43221	0.71573	0.85487	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.34505	0.87817	0.44498	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.39853	0.85513	0.79156	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.50676	0.59122	0.64926	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.31768	0.44696	0.43578	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (4,1)

```

data_6MR-4-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05582  0.33940  0.90059  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43822  0.09290  0.34408  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16707  0.88296  0.12673  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.33324  0.88346  0.13867  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.06051  0.66974  0.91154  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05901  0.89710  0.68625  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.33363  0.11660  0.90051  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16723  0.11020  0.89967  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05451  0.88462  0.35445  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43828  0.32496  0.10748  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55351  0.33807  0.89167  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.94182  0.11469  0.35435  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66974  0.88811  0.12798  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.83549  0.90231  0.14018  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.94730  0.12670  0.68668  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.56857  0.66459  0.91067  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94776  0.67217  0.14151  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.57119  0.89377  0.68563  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.83518  0.13099  0.91419  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.67018  0.10600  0.89543  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55580  0.87935  0.35014  0.00000  Uiso  1.00

```

Si23	Si	0.94261	0.34225	0.12905	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.44861	0.12698	0.67987	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44745	0.65786	0.13458	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01753	0.33777	0.05095	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.01568	0.03382	0.34639	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.16360	0.03273	0.04939	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33862	0.99340	0.01304	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.50024	0.97942	0.70976	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48962	0.66199	0.97162	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07726	0.50475	0.86725	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42450	0.15569	0.50269	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24896	0.84859	0.16921	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42295	0.48208	0.17481	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07559	0.85569	0.52089	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24957	0.14726	0.86480	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12996	0.26090	0.91832	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.43311	0.21292	0.22965	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.12828	0.90018	0.27530	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36706	0.73574	0.09928	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36769	0.06943	0.75238	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05100	0.74866	0.76404	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.49196	0.29254	0.75843	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37287	0.96232	0.29346	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12812	0.74836	0.01816	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00176	0.74811	0.27716	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12604	0.00469	0.76547	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37581	0.26990	0.97386	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51774	0.32775	0.04504	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51681	0.02946	0.34197	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.66619	0.03748	0.04977	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83955	0.98127	0.99137	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98424	0.97465	0.69247	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98663	0.67469	0.99164	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.58941	0.50083	0.87563	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92787	0.15855	0.52064	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75297	0.85794	0.16904	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92604	0.50697	0.17323	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57978	0.85373	0.51728	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75273	0.16640	0.87727	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61974	0.23703	0.88939	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95187	0.26226	0.27583	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63112	0.90252	0.27534	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87558	0.75530	0.12370	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87316	0.11402	0.76445	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56189	0.73696	0.75535	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00254	0.25889	0.76640	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87356	0.00951	0.27673	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63191	0.75334	0.01888	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50341	0.74445	0.27730	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64471	0.98304	0.76289	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87589	0.26491	0.02042	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.32950	0.83072	0.53743	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.32187	0.47097	0.73515	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.46535	0.52759	0.59734	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.40408	0.76264	0.77456	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.33628	0.53404	0.41365	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.37881	0.65005	0.59117	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.33521	0.91006	0.61707	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.28546	0.50798	0.79369	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.35023	0.41592	0.80072	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.29664	0.58359	0.35913	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.37364	0.50806	0.34060	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.46795	0.43942	0.65080	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.43228	0.71454	0.85143	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.34341	0.87571	0.44944	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.43515	0.85246	0.76151	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.50844	0.59273	0.63586	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.31335	0.43925	0.44543	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (5,1)

data\_6MR-5-1

\_audit\_creation\_date

2018-06-06

```

_audit_creation_method      'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number    1
_symmetry_cell_setting        triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a              18.6712
_cell_length_b              9.3357
_cell_length_c              9.3358
_cell_angle_alpha           94.7613
_cell_angle_beta            94.7629
_cell_angle_gamma           94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.06541  0.34726  0.90922  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.45095  0.10697  0.35437  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.17790  0.89517  0.14300  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.33862  0.89139  0.14636  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.07310  0.68055  0.92713  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.07459  0.90767  0.69974  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34130  0.10778  0.91304  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.18116  0.12187  0.91156  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.06256  0.88717  0.36654  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.45372  0.32859  0.12676  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.56479  0.33099  0.90462  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.94558  0.11596  0.36286  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.67644  0.87160  0.11867  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.84363  0.90436  0.15040  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.96042  0.13662  0.69628  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.57402  0.66121  0.90481  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.95996  0.67572  0.15586  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.58195  0.88878  0.67552  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.84574  0.13034  0.92280  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.67884  0.10614  0.88786  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.56641  0.87815  0.34559  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.94959  0.34317  0.13592  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.45608  0.10225  0.68984  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.45449  0.66231  0.12165  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.02357  0.33646  0.05466  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.01600  0.02519  0.35267  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.17964  0.04275  0.06124  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.32535  0.96168  -0.00657  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.50209  0.94586  0.68478  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.49301  0.67705  0.95557  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.08926  0.51458  0.88586  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.43068  0.14717  0.51638  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.25802  0.85856  0.20493  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.42645  0.48633  0.15584  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.08777  0.86489  0.53282  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.26328  0.17338  0.87992  0.00000  Uiso  1.00
O38  O   0.13855  0.26590  0.92923  0.00000  Uiso  1.00
O39  O   0.46203  0.25698  0.27920  0.00000  Uiso  1.00
O40  O   0.13477  0.91848  0.28510  0.00000  Uiso  1.00
O41  O   0.37405  0.74341  0.12260  0.00000  Uiso  1.00
O42  O   0.37430  0.05444  0.76427  0.00000  Uiso  1.00
O43  O   0.06503  0.76033  0.77974  0.00000  Uiso  1.00
O44  O   0.50503  0.25128  0.78337  0.00000  Uiso  1.00
O45  O   0.38316  0.00863  0.26476  0.00000  Uiso  1.00
O46  O   0.14101  0.75864  0.03445  0.00000  Uiso  1.00
O47  O   0.01640  0.74028  0.29313  0.00000  Uiso  1.00
O48  O   0.14352  0.01200  0.77678  0.00000  Uiso  1.00
O49  O   0.39509  0.22732  0.01280  0.00000  Uiso  1.00
O50  O   0.53241  0.33808  0.06210  0.00000  Uiso  1.00
O51  O   0.52467  0.02542  0.35304  0.00000  Uiso  1.00
O52  O   0.67110  0.00714  0.02148  0.00000  Uiso  1.00
O53  O   0.85214  0.98222  0.00200  0.00000  Uiso  1.00
O54  O   0.00130  0.98981  0.70662  0.00000  Uiso  1.00

```

O55	O	0.99881	0.68622	0.00617	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.58596	0.49358	0.86168	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.93601	0.16272	0.53061	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76045	0.84850	0.16329	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.93548	0.50948	0.17920	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.59279	0.84146	0.50830	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76316	0.15469	0.87375	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63862	0.25059	0.91729	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95943	0.26159	0.28197	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63874	0.90937	0.26484	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88966	0.76477	0.14652	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88844	0.11822	0.77929	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.58566	0.74608	0.76247	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01405	0.27550	0.76793	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87362	0.01809	0.28920	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63638	0.72449	0.03291	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51234	0.74344	0.26980	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64509	0.01425	0.73838	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88066	0.26845	0.03125	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.27716	0.86096	0.55973	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.28231	0.50617	0.64348	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.40638	0.41161	0.63423	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.37864	0.73844	0.76425	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.42156	0.77923	0.48147	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.31275	0.56533	0.35953	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.34537	0.66061	0.55788	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.30558	0.94399	0.61553	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.26946	0.54403	0.73775	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.32535	0.44721	0.66179	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.29057	0.63844	0.29627	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.35359	0.52517	0.30323	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.44408	0.39788	0.71079	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.42304	0.71220	0.82010	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.26812	0.88955	0.46199	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.37893	0.84445	0.78044	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.41010	0.32637	0.56460	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.27398	0.48263	0.36744	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.45242	0.74223	0.40657	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.45410	0.83638	0.56183	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (0,2)

```

data_6MR-0-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.06086  0.32378  0.88080  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.45190  0.07657  0.31285  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.17431  0.87075  0.11579  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.33514  0.86157  0.10577  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.06826  0.65650  0.90167  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.06800  0.88251  0.67409  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.33606  0.08353  0.88044  0.00000  Uiso  1.00

```



Si9	Si	0.17502	0.09691	0.88637	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.05966	0.86095	0.34181	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.45100	0.29454	0.09362	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.56109	0.29776	0.87511	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.94286	0.08939	0.33573	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.67258	0.85398	0.09675	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.84307	0.87993	0.12161	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.95566	0.11410	0.66737	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.57009	0.64231	0.87775	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.95589	0.64898	0.13329	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.57494	0.86255	0.65868	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.84425	0.10351	0.89773	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.67388	0.08165	0.87050	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.56172	0.86087	0.31348	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.94503	0.31767	0.10822	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.45403	0.07927	0.66275	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.45274	0.64495	0.09018	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01813	0.31218	0.02478	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.01411	0.00072	0.32841	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.17275	0.01996	0.03685	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.32382	0.92778	-0.05065	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.49650	0.91432	0.70676	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48912	0.68560	0.91932	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.08448	0.49111	0.85783	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43631	0.07286	0.47847	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.25602	0.83906	0.16863	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.43942	0.46202	0.09773	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.08429	0.83909	0.50878	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.25669	0.14436	0.85214	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.13371	0.24256	0.90165	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45238	0.23673	0.25492	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.13182	0.88711	0.25955	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36660	0.70718	0.07662	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37112	0.05216	0.73155	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05718	0.73559	0.75418	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50990	0.22643	0.73669	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.38773	0.96941	0.21959	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.13727	0.73565	0.00464	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01144	0.71550	0.27082	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.13657	0.98593	0.75293	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.38440	0.20140	0.99281	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.52703	0.26345	0.02571	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.53002	0.01538	0.28768	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65902	-0.00310	0.01255	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.86061	0.95891	0.97729	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	-0.00526	0.96502	0.67695	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.99499	0.66030	0.98427	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57372	0.47092	0.86288	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.93209	0.14065	0.50170	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75794	0.83462	0.12148	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.93183	0.48297	0.15738	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57290	0.83987	0.48589	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75940	0.11052	0.85720	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.64061	0.23585	0.88181	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95569	0.23239	0.25121	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.64142	0.86706	0.25348	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88418	0.73421	0.12241	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88306	0.09935	0.74934	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.58286	0.70618	0.72257	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01020	0.25134	0.73877	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87113	-0.01112	0.26485	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63259	0.71176	0.00081	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50702	0.72883	0.23788	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63943	-0.01769	0.72444	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87511	0.24667	0.00341	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.39567	0.74477	0.51782	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.34553	0.61473	0.78071	0.00000	Uiso	1.00
Cu76	Cu	0.42679	0.74885	0.73533	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.43740	0.71528	0.45886	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.35082	0.67710	0.48009	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.29711	0.62675	0.72476	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.34051	0.63875	0.89095	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.35551	0.50820	0.76578	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.38634	0.84778	0.49249	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (1,2)

```
data_6MR-1-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.06314  0.31757  0.88175  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.45009  0.07600  0.33245  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.17804  0.86203  0.11379  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.34357  0.86968  0.12557  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.07202  0.64999  0.90028  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.07173  0.87720  0.67368  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34307  0.10796  0.89214  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.17740  0.09137  0.88763  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.06403  0.86056  0.34165  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.44962  0.31321  0.09932  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.56743  0.30870  0.88780  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.95037  0.08826  0.33839  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.67840  0.84621  0.10199  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.84537  0.87519  0.12523  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.95857  0.10706  0.66984  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.57776  0.63625  0.89219  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.95795  0.64766  0.12985  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.57668  0.86805  0.66079  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.84367  0.10264  0.89802  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.67635  0.08643  0.87864  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.56553  0.85782  0.33336  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.94724  0.31503  0.11019  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.45632  0.08807  0.66404  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.45654  0.64179  0.11702  0.00000  Uiso  1.00
O26  O  0.01953  0.30650  0.02457  0.00000  Uiso  1.00
O27  O  0.02505  0.00969  0.33369  0.00000  Uiso  1.00
O28  O  0.17470  0.01162  0.03608  0.00000  Uiso  1.00
O29  O  0.34559  0.98219  0.00211  0.00000  Uiso  1.00
O30  O  0.49140  0.91006  0.65250  0.00000  Uiso  1.00
O31  O  0.50242  0.65062  0.96107  0.00000  Uiso  1.00
O32  O  0.08700  0.48406  0.85689  0.00000  Uiso  1.00
O33  O  0.43568  0.13780  0.49193  0.00000  Uiso  1.00
O34  O  0.26029  0.83191  0.16058  0.00000  Uiso  1.00
O35  O  0.43221  0.46921  0.16409  0.00000  Uiso  1.00
O36  O  0.08723  0.83374  0.50798  0.00000  Uiso  1.00
O37  O  0.25929  0.14074  0.85640  0.00000  Uiso  1.00
O38  O  0.13581  0.23622  0.90506  0.00000  Uiso  1.00
O39  O  0.44639  0.19864  0.22080  0.00000  Uiso  1.00
O40  O  0.13672  0.87604  0.25920  0.00000  Uiso  1.00
O41  O  0.37825  0.72622  0.06926  0.00000  Uiso  1.00
O42  O  0.37447  0.05403  0.74221  0.00000  Uiso  1.00
O43  O  0.06194  0.72984  0.75323  0.00000  Uiso  1.00
O44  O  0.51595  0.21273  0.76436  0.00000  Uiso  1.00
O45  O  0.38545  0.94423  0.27949  0.00000  Uiso  1.00
O46  O  0.14142  0.72675  0.00325  0.00000  Uiso  1.00
O47  O  0.01027  0.72328  0.26843  0.00000  Uiso  1.00
O48  O  0.14042  -0.01796  0.75146  0.00000  Uiso  1.00
O49  O  0.38889  0.25552  0.96414  0.00000  Uiso  1.00
```

O50	O	0.52988	0.32079	0.03993	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.52889	0.01092	0.33259	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.67021	-0.01384	0.01147	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85189	0.95519	0.97758	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	-0.00198	0.95827	0.67948	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.99904	0.65631	0.98308	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.58650	0.46950	0.83504	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.93519	0.13290	0.50375	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76250	0.83332	0.15294	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.93564	0.48166	0.15768	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.59566	0.82802	0.49726	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76010	0.11878	0.84708	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.64411	0.23866	0.91783	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95886	0.23348	0.25566	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63618	0.86943	0.24443	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88486	0.72753	0.10923	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88678	0.09363	0.75465	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.58067	0.72513	0.74756	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01342	0.24453	0.73909	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88274	-0.01987	0.26351	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.64733	0.69832	0.00447	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50686	0.72582	0.27273	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63139	0.00201	0.73445	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87661	0.24191	0.00797	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.33421	0.83999	0.54588	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.46921	0.57856	0.52428	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.36074	0.61953	0.75499	0.00000	Uiso	1.00
Cu77	Cu	0.41938	0.73437	0.62889	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.48603	0.61941	0.43029	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.51400	0.55207	0.58464	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.34402	0.87513	0.45140	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.30691	0.60940	0.71914	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.36673	0.67110	0.85975	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.43680	0.48510	0.49237	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.37659	0.51780	0.76466	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.33413	0.92900	0.61475	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (2,2)

```

data_6MR-2-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.06317  0.35570  0.89597  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.45089  0.11093  0.34319  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.17790  0.90293  0.12868  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.34111  0.89828  0.13681  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.07138  0.68947  0.91433  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.07289  0.91538  0.68694  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34215  0.13255  0.90329  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.17892  0.12993  0.89954  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.06290  0.89709  0.35432  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.45299  0.34321  0.10972  0.00000  Uiso  1.00

```

Si12	Si	0.56534	0.34680	0.88731	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.94643	0.12532	0.35223	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.67774	0.88851	0.10942	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.84300	0.91219	0.14086	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.95893	0.14561	0.68417	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.57496	0.67311	0.89461	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.95856	0.68475	0.14389	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.57427	0.89716	0.66947	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.84348	0.13792	0.91155	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.67776	0.11601	0.88902	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.56499	0.88895	0.34592	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.94714	0.35117	0.12352	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.45397	0.12815	0.67301	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.45436	0.67343	0.12887	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01997	0.34201	0.03930	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.01852	0.03907	0.34491	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.17776	0.05211	0.04919	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33796	0.99926	0.00260	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.49735	0.96766	0.66137	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.50230	0.67562	0.97615	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.08707	0.52310	0.87438	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43143	0.17603	0.49934	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.25860	0.86715	0.18082	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.43323	0.49850	0.17353	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.08807	0.87283	0.52073	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.26075	0.18126	0.86681	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.13585	0.27324	0.91536	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45715	0.24015	0.23959	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.13497	0.92315	0.27176	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.37410	0.75042	0.09020	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37480	0.07759	0.75475	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.06216	0.76757	0.76571	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50577	0.27490	0.76266	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.38780	-0.01236	0.27544	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.13953	0.76876	0.01873	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01370	0.75330	0.28157	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.14229	0.01809	0.76481	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.39044	0.27462	-0.01756	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.53128	0.35396	0.04324	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.52908	0.04257	0.35350	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.67660	0.04337	0.04151	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84922	0.99017	0.99187	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.00009	-0.00110	0.69269	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	-0.00256	0.69584	-0.00542	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.59254	0.50885	0.84975	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.93395	0.17157	0.51875	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76005	0.86065	0.16234	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.93474	0.51823	0.16766	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.59691	0.85810	0.50728	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76074	0.15783	0.85686	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63763	0.26172	0.90064	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95809	0.27052	0.26994	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63205	0.89458	0.24808	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88693	0.77002	0.13216	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88790	0.12682	0.77024	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56198	0.74425	0.74088	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01249	0.28524	0.75320	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87594	0.02367	0.27856	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.64493	0.75848	-0.01000	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50332	0.75978	0.28607	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63888	0.00257	0.75899	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87680	0.27677	0.02143	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.32680	0.79023	0.69873	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.41279	0.77619	0.48496	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.45424	0.49588	0.52147	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.37781	0.53313	0.79352	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.39521	0.63726	0.62322	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.35029	0.89119	0.72727	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.45220	0.50887	0.41215	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.50681	0.52069	0.56463	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.36071	0.42530	0.77946	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.42684	0.54501	0.85580	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.29296	0.80352	0.61615	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.34267	0.58521	0.85465	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.44148	0.38655	0.52975	0.00000	Uiso	1.00

H87	H	0.44507	0.75645	0.40444	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.44125	0.85869	0.54812	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (3,2)

```

data_6MR-3-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.06969  0.35855  0.90919  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.46013  0.11567  0.34640  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.18477  0.90335  0.14281  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.34628  0.89990  0.13497  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.08005  0.69165  0.92884  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.07851  0.91891  0.70191  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34624  0.12020  0.90791  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.18447  0.13251  0.91641  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.06866  0.89943  0.36979  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.45981  0.33639  0.12154  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.56896  0.34971  0.88900  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.95433  0.12730  0.36386  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.68350  0.89165  0.12011  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.85019  0.91548  0.14920  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.96452  0.14791  0.69603  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.58037  0.67597  0.90417  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.96437  0.68849  0.15823  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.58203  0.90072  0.68113  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.84961  0.14511  0.92301  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.68306  0.11679  0.89719  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.57121  0.88432  0.35409  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.95381  0.35589  0.13609  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.45904  0.13265  0.67950  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.46039  0.67117  0.13452  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.02722  0.34913  0.05373  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.02867  0.04675  0.35924  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.18088  0.05296  0.06563  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.33452  0.96538  0.97871  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.50815  0.97980  0.68368  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.50517  0.67853  0.97895  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.09363  0.52516  0.88378  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.43370  0.16298  0.50115  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.26676  0.87556  0.19918  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.43247  0.49293  0.16804  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.09477  0.87471  0.53599  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.26652  0.18242  0.88720  0.00000  Uiso  1.00
O38  O   0.14239  0.27715  0.93213  0.00000  Uiso  1.00
O39  O   0.47708  0.26378  0.27061  0.00000  Uiso  1.00
O40  O   0.14106  0.91266  0.28578  0.00000  Uiso  1.00
O41  O   0.37752  0.74533  0.11618  0.00000  Uiso  1.00
O42  O   0.37889  0.09483  0.75679  0.00000  Uiso  1.00
O43  O   0.06863  0.77179  0.78198  0.00000  Uiso  1.00
O44  O   0.50903  0.28823  0.76042  0.00000  Uiso  1.00
O45  O   0.39710  0.01357  0.24692  0.00000  Uiso  1.00

```

O46	O	0.15070	0.76710	0.02994	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01516	0.76020	0.30100	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.14689	0.02334	0.78038	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.39640	0.23855	0.01912	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.53434	0.35422	0.04450	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.53472	0.03703	0.35722	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.67975	0.04553	0.05056	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85755	0.99811	0.00345	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.00473	0.99972	0.70448	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.00825	0.69960	0.01520	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.59990	0.51250	0.86236	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.94125	0.17425	0.52990	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76690	0.86700	0.16885	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.94140	0.52220	0.18362	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.60068	0.85705	0.51714	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76659	0.16701	0.87468	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63859	0.25683	0.90055	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.96400	0.27202	0.28051	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.64074	0.89531	0.26266	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.89230	0.77079	0.13464	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.89235	0.13267	0.77910	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56928	0.74815	0.75209	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01900	0.28531	0.76764	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88569	0.02055	0.29000	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.64917	0.75980	0.00458	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51076	0.75417	0.29067	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.65145	-0.00117	0.76490	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88425	0.28433	0.03089	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.27807	0.73819	0.56147	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.32982	0.54896	0.33814	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.41458	0.80459	0.49609	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.44493	0.47487	0.53335	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.37050	0.61666	0.76796	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.36342	0.59931	0.55052	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.30122	0.82525	0.52601	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.47345	0.50642	0.44981	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.48047	0.48283	0.62460	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.36740	0.51016	0.27605	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.35006	0.52428	0.80847	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.42224	0.64140	0.81831	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.23081	0.71803	0.50735	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.34077	0.69832	0.80360	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.42988	0.36474	0.51091	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.31723	0.63383	0.28912	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.44521	0.78592	0.41551	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.44720	0.86365	0.57313	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (4,2)

```

data_6MR-4-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy

```

Si2	Si	0.07022	0.34752	0.90787	0.00000	Uiso	1.00
Si3	Si	0.45981	0.10806	0.34795	0.00000	Uiso	1.00
Si4	Si	0.18574	0.89466	0.14027	0.00000	Uiso	1.00
Si5	Si	0.34661	0.89201	0.13576	0.00000	Uiso	1.00
Si6	Si	0.08042	0.68251	0.92808	0.00000	Uiso	1.00
Si7	Si	0.08086	0.90808	0.69920	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.34698	0.11333	0.90718	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.18621	0.12398	0.91289	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.06982	0.88971	0.36848	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.45996	0.33012	0.12200	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.57127	0.33536	0.89560	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.95489	0.11752	0.36533	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.68500	0.87488	0.11875	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.85079	0.90339	0.15232	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.96606	0.13662	0.69523	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.58442	0.66267	0.90504	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.96547	0.67801	0.15772	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.58189	0.88896	0.67750	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.85058	0.13070	0.92357	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.68404	0.10710	0.89726	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.57014	0.87391	0.35193	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.95423	0.34322	0.13503	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.46012	0.11263	0.67974	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.46070	0.66250	0.13171	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.02691	0.33323	0.05084	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.02903	0.03639	0.36360	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.18331	0.04396	0.06162	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33319	0.96344	0.98317	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.50328	0.95116	0.67523	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.51102	0.67790	0.98335	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.09292	0.51514	0.88522	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43499	0.15013	0.50468	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.26713	0.86640	0.19857	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.43189	0.48617	0.16434	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.09802	0.86243	0.53351	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.26778	0.17722	0.88090	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.14341	0.26760	0.92953	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.47519	0.25333	0.26853	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.14088	0.90760	0.28155	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.38020	0.74158	0.10613	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37958	0.07577	0.75715	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.06996	0.76170	0.78023	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.51322	0.25703	0.77218	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.39675	0.00278	0.25151	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.15110	0.75820	0.02844	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01656	0.74979	0.30014	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.14891	0.01364	0.77732	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.39872	0.23414	0.01152	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.53627	0.35028	0.05016	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.53438	0.02678	0.35570	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.68092	0.02598	0.04472	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85700	0.98396	0.00510	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.00702	0.98898	0.69869	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.00843	0.69324	0.01391	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.59739	0.49714	0.85590	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.94040	0.16480	0.53060	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76783	0.85638	0.17692	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.94321	0.51069	0.18033	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.60212	0.84606	0.51412	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76773	0.14976	0.86968	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.64443	0.25312	0.91618	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.96488	0.26150	0.28083	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63759	0.87909	0.25485	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.89253	0.75837	0.13779	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.89549	0.11789	0.78278	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.57657	0.73689	0.75225	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.02036	0.27486	0.76494	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88672	0.01018	0.29097	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.65600	0.73860	0.00312	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50929	0.74128	0.29399	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64601	0.00109	0.76036	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88367	0.27065	0.03253	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.25205	0.71234	0.47702	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.50155	0.53989	0.52018	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.34112	0.50355	0.38024	0.00000	Uiso	1.00

O77	O	0.40828	0.78293	0.48763	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.37680	0.40485	0.65510	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.38764	0.71487	0.76911	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.38964	0.59699	0.57803	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.27833	0.79536	0.44188	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.51292	0.58525	0.43253	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.53857	0.58399	0.59530	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.37083	0.49841	0.29564	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.32805	0.37782	0.69361	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.41703	0.39320	0.73452	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.34925	0.67627	0.83221	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.43615	0.71909	0.83230	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.20312	0.74019	0.48352	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.37742	0.81989	0.75520	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.38367	0.32889	0.57115	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.30087	0.56305	0.36087	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.43854	0.76511	0.40563	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.44191	0.84797	0.55980	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (0,3)

```

data_6MR-0-3
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05923  0.32195  0.88619  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.44855  0.08210  0.33743  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.17355  0.86791  0.11792  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.34043  0.87494  0.13510  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.06896  0.65603  0.90499  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.06713  0.88261  0.67846  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34049  0.10807  0.89679  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.17327  0.09557  0.89211  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05838  0.86435  0.34566  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.44696  0.31564  0.10258  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.56113  0.32601  0.88240  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.94510  0.09295  0.34124  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.67420  0.86690  0.10860  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.83956  0.87978  0.12761  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.95338  0.11092  0.67420  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.56989  0.65174  0.89533  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.95357  0.65376  0.13401  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56946  0.87898  0.66803  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.83886  0.10862  0.90123  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.67343  0.09302  0.89161  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.56198  0.85784  0.34651  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.94435  0.31990  0.11414  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.45085  0.11137  0.66365  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.45244  0.64355  0.13491  0.00000  Uiso  1.00
O26  O  0.01766  0.31047  0.03189  0.00000  Uiso  1.00
O27  O  0.01936  0.01318  0.33444  0.00000  Uiso  1.00
O28  O  0.16729  0.01755  0.04132  0.00000  Uiso  1.00
O29  O  0.34508  0.97778  0.00303  0.00000  Uiso  1.00

```



O30	O	0.49552	0.95332	0.65636	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.49865	0.65442	0.98002	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.08166	0.48900	0.86128	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43285	0.16289	0.48917	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.25620	0.84414	0.16818	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42985	0.46834	0.18047	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.08233	0.84037	0.51231	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.25606	0.13861	0.86463	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.13275	0.24243	0.90543	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45240	0.19740	0.21850	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.13061	0.87592	0.26160	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.37324	0.72491	0.09513	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37360	0.06000	0.74834	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05795	0.73477	0.75737	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50427	0.25794	0.75250	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.38336	0.95420	0.28516	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.13977	0.73123	0.00534	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00377	0.72652	0.27666	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.13577	0.98719	0.75570	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.38303	0.25731	0.97573	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.52543	0.33388	0.03633	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.52611	0.01155	0.34674	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.67360	0.02555	0.04741	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84440	0.95978	0.97959	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	-0.00685	0.96267	0.68501	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	-0.00303	0.66691	0.99071	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.59003	0.48977	0.84801	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.93089	0.13622	0.50751	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75660	0.83390	0.15457	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.93144	0.48666	0.15769	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.59577	0.83417	0.51001	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75576	0.13342	0.85431	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63291	0.23858	0.89828	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95422	0.23992	0.26108	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63008	0.86415	0.24900	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88044	0.73373	0.11176	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88058	0.09623	0.75613	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54993	0.72173	0.73876	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00750	0.24864	0.74594	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87677	-0.01323	0.26504	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.64000	0.74400	-0.01855	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50296	0.72505	0.29081	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63506	-0.02817	0.76730	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87475	0.24558	0.01038	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.49795	0.48268	0.51611	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.37311	0.64098	0.44370	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.39190	0.73360	0.75930	0.00000	Uiso	1.00
Cu77	Cu	0.44556	0.63024	0.61613	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.50537	0.51012	0.41324	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.54738	0.47949	0.57249	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.38715	0.73753	0.40211	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.37751	0.55976	0.36345	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.34120	0.68723	0.77109	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.38775	0.84122	0.74272	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.47212	0.37893	0.50858	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.42139	0.73091	0.85806	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.32024	0.64006	0.46584	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (1,3)

```

data_6MR-1-3
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a             18.6712
_cell_length_b             9.3357
_cell_length_c             9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613

```

_cell_angle_beta	94.7629
_cell_angle_gamma	94.7613
loop_	
_atom_site_label	
_atom_site_type_symbol	
_atom_site_fract_x	
_atom_site_fract_y	
_atom_site_fract_z	
_atom_site_U_iso_or_equiv	
_atom_site_adp_type	
_atom_site_occupancy	
Si2	Si 0.06397 0.35382 0.90724 0.00000 Uiso 1.00
Si3	Si 0.44683 0.10814 0.33725 0.00000 Uiso 1.00
Si4	Si 0.17596 0.90016 0.13430 0.00000 Uiso 1.00
Si5	Si 0.33615 0.88640 0.12492 0.00000 Uiso 1.00
Si6	Si 0.06717 0.68777 0.91965 0.00000 Uiso 1.00
Si7	Si 0.06754 0.91111 0.69240 0.00000 Uiso 1.00
Si8	Si 0.33699 0.10734 0.89489 0.00000 Uiso 1.00
Si9	Si 0.17663 0.12697 0.90622 0.00000 Uiso 1.00
Si10	Si 0.06247 0.90199 0.36276 0.00000 Uiso 1.00
Si11	Si 0.45213 0.32075 0.10191 0.00000 Uiso 1.00
Si12	Si 0.56078 0.33207 0.88349 0.00000 Uiso 1.00
Si13	Si 0.94893 0.12960 0.36374 0.00000 Uiso 1.00
Si14	Si 0.67544 0.89052 0.11445 0.00000 Uiso 1.00
Si15	Si 0.84305 0.91647 0.15087 0.00000 Uiso 1.00
Si16	Si 0.95723 0.14335 0.69257 0.00000 Uiso 1.00
Si17	Si 0.57987 0.67727 0.90573 0.00000 Uiso 1.00
Si18	Si 0.95485 0.68855 0.15045 0.00000 Uiso 1.00
Si19	Si 0.57979 0.89406 0.67318 0.00000 Uiso 1.00
Si20	Si 0.84465 0.14248 0.92332 0.00000 Uiso 1.00
Si21	Si 0.67730 0.10962 0.88455 0.00000 Uiso 1.00
Si22	Si 0.55732 0.87728 0.34267 0.00000 Uiso 1.00
Si23	Si 0.94880 0.35514 0.13474 0.00000 Uiso 1.00
Al24	Al 0.45494 0.11664 0.67181 0.00000 Uiso 1.00
Al25	Al 0.45587 0.67275 0.11833 0.00000 Uiso 1.00
O26	O 0.02232 0.34335 0.05285 0.00000 Uiso 1.00
O27	O 0.02382 0.05170 0.36059 0.00000 Uiso 1.00
O28	O 0.17794 0.05151 0.05772 0.00000 Uiso 1.00
O29	O 0.32419 -0.04248 -0.02908 0.00000 Uiso 1.00
O30	O 0.50720 0.97216 0.69340 0.00000 Uiso 1.00
O31	O 0.50770 0.71878 0.97770 0.00000 Uiso 1.00
O32	O 0.08410 0.52168 0.88125 0.00000 Uiso 1.00
O33	O 0.42452 0.14877 0.49690 0.00000 Uiso 1.00
O34	O 0.25614 0.85769 0.18322 0.00000 Uiso 1.00
O35	O 0.43935 0.48764 0.11478 0.00000 Uiso 1.00
O36	O 0.08628 0.87057 0.52785 0.00000 Uiso 1.00
O37	O 0.25747 0.16819 0.86099 0.00000 Uiso 1.00
O38	O 0.13876 0.27723 0.92700 0.00000 Uiso 1.00
O39	O 0.45467 0.26045 0.26147 0.00000 Uiso 1.00
O40	O 0.13477 0.92057 0.27955 0.00000 Uiso 1.00
O41	O 0.37067 0.73659 0.09495 0.00000 Uiso 1.00
O42	O 0.37442 0.07520 0.74916 0.00000 Uiso 1.00
O43	O 0.05756 0.76189 0.76893 0.00000 Uiso 1.00
O44	O 0.50070 0.28384 0.74760 0.00000 Uiso 1.00
O45	O 0.38397 0.00025 0.24275 0.00000 Uiso 1.00
O46	O 0.13509 0.76982 0.02278 0.00000 Uiso 1.00
O47	O 0.00864 0.76685 0.28560 0.00000 Uiso 1.00
O48	O 0.13346 0.01792 0.77688 0.00000 Uiso 1.00
O49	O 0.38395 0.23363 0.00127 0.00000 Uiso 1.00
O50	O 0.52801 0.29212 0.03352 0.00000 Uiso 1.00
O51	O 0.52279 0.03315 0.34048 0.00000 Uiso 1.00
O52	O 0.66624 0.03916 0.03644 0.00000 Uiso 1.00
O53	O 0.85294 0.99528 0.00335 0.00000 Uiso 1.00
O54	O -0.00679 0.99016 0.69333 0.00000 Uiso 1.00
O55	O 0.99338 0.69630 0.00019 0.00000 Uiso 1.00
O56	O 0.58377 0.50406 0.88211 0.00000 Uiso 1.00
O57	O 0.93408 0.17722 0.52870 0.00000 Uiso 1.00
O58	O 0.75903 0.88378 0.17598 0.00000 Uiso 1.00
O59	O 0.93651 0.52178 0.18029 0.00000 Uiso 1.00
O60	O 0.59073 0.85410 0.50489 0.00000 Uiso 1.00
O61	O 0.76153 0.16391 0.87742 0.00000 Uiso 1.00
O62	O 0.63352 0.25055 0.87196 0.00000 Uiso 1.00
O63	O 0.95808 0.27460 0.28105 0.00000 Uiso 1.00
O64	O 0.62587 0.88585 0.24647 0.00000 Uiso 1.00
O65	O 0.88032 0.76533 0.13636 0.00000 Uiso 1.00

O66	O	0.88580	0.13057	0.77777	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.57559	0.73665	0.74377	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01441	0.27501	0.76700	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88173	0.01999	0.28933	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.65355	0.74999	-0.00186	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49779	0.74467	0.28625	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.65205	-0.01007	0.74948	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87932	0.28235	0.03001	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.49506	0.51577	0.58821	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.38435	0.52262	0.39341	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.33795	0.39123	0.66807	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.38966	0.72044	0.76476	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.38838	0.57534	0.60040	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.53291	0.59068	0.63285	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.42564	0.59307	0.36486	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.40094	0.42137	0.36851	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.28414	0.38560	0.68383	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.36485	0.37515	0.76543	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.35039	0.70567	0.83454	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.43798	0.72854	0.83093	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.38544	0.82270	0.73154	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.50002	0.42761	0.64143	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.34617	0.30363	0.59810	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.33878	0.53445	0.32770	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (2,3)

```

data_6MR-2-3
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.06697  0.34370  0.90389  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.45497  0.10213  0.34986  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.18246  0.89002  0.13538  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.34533  0.89052  0.14131  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.07602  0.67639  0.92077  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.07705  0.90256  0.69438  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34586  0.12368  0.90729  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.18304  0.11682  0.90606  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.06704  0.88541  0.36076  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.45595  0.33445  0.11728  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.56831  0.33794  0.89557  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.95184  0.11396  0.35887  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.68218  0.87840  0.11639  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.84677  0.90099  0.14720  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.96255  0.13272  0.69233  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.58016  0.66474  0.90156  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.96215  0.67343  0.15008  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.58135  0.88739  0.67766  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.84737  0.12754  0.91840  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.68256  0.10552  0.89604  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.56775  0.87959  0.35123  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.95237  0.34078  0.13225  0.00000  Uiso  1.00

```

Al24	Al	0.45924	0.11866	0.68137	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.45915	0.66576	0.13302	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.02615	0.33402	0.05059	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.02460	0.02981	0.34982	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.18266	0.03980	0.05671	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33962	0.98879	0.00567	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.50603	0.96327	0.67863	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.50837	0.67423	0.98381	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.09216	0.51024	0.88052	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43645	0.16447	0.50717	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.26338	0.85383	0.18810	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.43665	0.49126	0.17772	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.09098	0.86134	0.52749	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.26406	0.17213	0.87228	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.13878	0.25851	0.92112	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45969	0.23471	0.25003	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.13953	0.90774	0.27851	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.37862	0.74338	0.09143	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37936	0.07420	0.76011	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.06618	0.75406	0.77209	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50690	0.27286	0.77010	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.39167	0.97946	0.27992	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.14477	0.75614	0.02389	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01652	0.74332	0.28832	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.14722	0.00286	0.77253	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.39256	0.26443	0.99331	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.53440	0.34181	0.05161	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.53327	0.03489	0.35708	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.68204	0.03414	0.04935	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85085	0.97889	-0.00225	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.00496	0.98786	0.70366	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.00254	0.68241	0.00224	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.59809	0.49936	0.86276	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.93923	0.15715	0.52590	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76427	0.85138	0.17375	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.93834	0.50723	0.17522	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.60031	0.85022	0.51252	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76528	0.15591	0.86766	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63799	0.24541	0.90359	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.96294	0.26111	0.27938	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63440	0.88234	0.25203	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.89054	0.75848	0.13472	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.89054	0.11240	0.77535	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56929	0.73270	0.74551	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01436	0.27413	0.76353	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88199	0.01190	0.28351	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.65141	0.74949	0.99460	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50464	0.75265	0.29404	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64856	-0.01155	0.76457	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88365	0.26399	0.02795	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.28100	0.60027	0.46148	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.41765	0.77022	0.50892	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.46859	0.49239	0.50769	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.37202	0.42121	0.71956	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.35116	0.73123	0.76028	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.39940	0.59921	0.62162	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.26288	0.53291	0.37870	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.46066	0.50233	0.39801	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.51966	0.53754	0.54391	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.33725	0.43131	0.79849	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.41859	0.38442	0.76595	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.36420	0.72174	0.86886	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.36234	0.83910	0.74586	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.29497	0.69015	0.42010	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.29634	0.70896	0.73910	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.46625	0.38320	0.52020	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.34954	0.33960	0.64452	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.44662	0.75484	0.42339	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.44796	0.84715	0.57487	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (3,3)

data\_6MR-3-3

```

_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a           18.6712
_cell_length_b           9.3357
_cell_length_c           9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.07535  0.36454  0.92347  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.46567  0.11820  0.35651  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.19095  0.90985  0.15516  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.35209  0.90473  0.14348  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.08366  0.69624  0.94069  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.08492  0.92292  0.71506  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.35137  0.12995  0.91872  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.19103  0.13743  0.92772  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.07637  0.90442  0.38179  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.46491  0.34322  0.13383  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.57580  0.35103  0.90489  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.96083  0.13304  0.37933  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.69020  0.89055  0.13370  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.85616  0.92030  0.16742  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.97059  0.15348  0.71207  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.59065  0.67853  0.91883  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.97086  0.69192  0.17156  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.58876  0.90291  0.69555  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.85619  0.14626  0.93949  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.68963  0.11857  0.91411  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.57524  0.88540  0.36748  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.96091  0.36030  0.15248  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.46554  0.13034  0.69305  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.46678  0.67742  0.15096  0.00000  Uiso  1.00
O26  O  0.03427  0.35591  0.06973  0.00000  Uiso  1.00
O27  O  0.03358  0.04852  0.37187  0.00000  Uiso  1.00
O28  O  0.19009  0.06068  0.07860  0.00000  Uiso  1.00
O29  O  0.33872  0.97740  -0.00864  0.00000  Uiso  1.00
O30  O  0.51316  0.97631  0.69922  0.00000  Uiso  1.00
O31  O  0.51924  0.68830  0.00460  0.00000  Uiso  1.00
O32  O  0.10047  0.53081  0.89836  0.00000  Uiso  1.00
O33  O  0.44288  0.16538  0.51499  0.00000  Uiso  1.00
O34  O  0.27223  0.87234  0.20387  0.00000  Uiso  1.00
O35  O  0.43942  0.49963  0.18111  0.00000  Uiso  1.00
O36  O  0.10013  0.88004  0.54880  0.00000  Uiso  1.00
O37  O  0.27188  0.19256  0.89375  0.00000  Uiso  1.00
O38  O  0.14683  0.27916  0.94119  0.00000  Uiso  1.00
O39  O  0.48151  0.26635  0.28106  0.00000  Uiso  1.00
O40  O  0.14920  0.92649  0.30042  0.00000  Uiso  1.00
O41  O  0.38701  0.75596  0.11597  0.00000  Uiso  1.00
O42  O  0.38372  0.10299  0.76670  0.00000  Uiso  1.00
O43  O  0.07316  0.77436  0.79237  0.00000  Uiso  1.00
O44  O  0.51515  0.28666  0.77690  0.00000  Uiso  1.00
O45  O  0.40035  0.01674  0.26323  0.00000  Uiso  1.00
O46  O  0.15187  0.77692  0.04413  0.00000  Uiso  1.00
O47  O  0.02596  0.76243  0.30855  0.00000  Uiso  1.00
O48  O  0.15466  0.02325  0.79426  0.00000  Uiso  1.00
O49  O  0.40235  0.24589  0.02962  0.00000  Uiso  1.00
O50  O  0.54050  0.35856  0.05880  0.00000  Uiso  1.00
O51  O  0.54054  0.03967  0.36439  0.00000  Uiso  1.00
O52  O  0.68539  0.04568  0.06645  0.00000  Uiso  1.00
O53  O  0.86225  0.99758  0.01805  0.00000  Uiso  1.00

```

O54	O	0.01262	0.00791	0.72192	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.01015	0.69969	0.02239	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.60583	0.51289	0.87350	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.94757	0.17836	0.54558	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.77320	0.87236	0.19139	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.94678	0.52620	0.19813	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.60777	0.86447	0.53069	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.77307	0.16955	0.89216	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.64539	0.25908	0.91797	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.97240	0.27902	0.29834	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.64211	0.88490	0.26849	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.89920	0.77686	0.15731	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.89838	0.13387	0.79486	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.57802	0.74861	0.76489	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.02268	0.29429	0.78331	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.89092	0.03089	0.30432	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.66280	0.75944	0.01107	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51275	0.75572	0.31489	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.65710	0.00310	0.78024	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.89182	0.28376	0.04854	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.41753	0.51042	0.81570	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.30970	0.54654	0.30865	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.42122	0.77439	0.52995	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.48203	0.50588	0.52576	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.33304	0.36969	0.55212	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.30429	0.66463	0.66976	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.38712	0.57181	0.57954	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.45057	0.58351	0.87648	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.48943	0.51911	0.41962	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.52277	0.56706	0.58992	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.35018	0.51976	0.25313	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.29499	0.37214	0.46654	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.30831	0.34196	0.64128	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.30199	0.63352	0.77236	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.31418	0.77501	0.67722	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.44587	0.42636	0.80292	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.25487	0.63866	0.61320	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.48644	0.39900	0.54091	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.36653	0.28956	0.52741	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.29571	0.63429	0.26816	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.45138	0.76641	0.44622	0.00000	Uiso	1.00
H95	H	0.45132	0.84082	0.60527	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (0,4)

data\_6MR-0-4

_audit_creation_date	2018-06-06						
_audit_creation_method	'Materials Studio'						
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'						
_symmetry_Int_Tables_number	1						
_symmetry_cell_setting	triclinic						
loop_							
_symmetry_equiv_pos_as_xyz							
x,y,z							
_cell_length_a	18.6712						
_cell_length_b	9.3357						
_cell_length_c	9.3358						
_cell_angle_alpha	94.7613						
_cell_angle_beta	94.7629						
_cell_angle_gamma	94.7613						
loop_							
_atom_site_label							
_atom_site_type_symbol							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_U_iso_or_equiv							
_atom_site_adp_type							
_atom_site_occupancy							
Si2	Si	0.06077	0.33888	0.89490	0.00000	Uiso	1.00
Si3	Si	0.45118	0.09673	0.34463	0.00000	Uiso	1.00
Si4	Si	0.17703	0.88404	0.12949	0.00000	Uiso	1.00
Si5	Si	0.34135	0.88766	0.13561	0.00000	Uiso	1.00

Si6	Si	0.07139	0.67064	0.91518	0.00000	Uiso	1.00
Si7	Si	0.07106	0.89771	0.68930	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.34030	0.12426	0.90367	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.17609	0.11166	0.90250	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.06180	0.87763	0.35587	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.45003	0.33161	0.11414	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.56448	0.33214	0.89283	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.94636	0.10600	0.35072	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.67735	0.87331	0.11551	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.84230	0.89336	0.13789	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.95704	0.12847	0.68398	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.57337	0.65669	0.89730	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.95737	0.66573	0.14555	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.57245	0.88139	0.67597	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.84168	0.12137	0.91129	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.67671	0.09798	0.89322	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.56452	0.87644	0.34773	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.94554	0.33389	0.12457	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.45418	0.11328	0.67706	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.45499	0.66061	0.12792	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01785	0.32851	0.03860	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.01921	0.02167	0.34338	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.17469	0.03441	0.05276	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33910	-0.01247	0.00102	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.49709	0.95430	0.68345	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.49873	0.65846	0.97120	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.08711	0.50492	0.87225	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43374	0.15908	0.50225	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.25900	0.85322	0.17990	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.43218	0.48825	0.17923	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.08605	0.85542	0.52302	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.25743	0.16632	0.87175	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.13208	0.25328	0.91649	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45379	0.22809	0.24352	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.13443	0.89731	0.27344	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.37440	0.73933	0.08815	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37257	0.08304	0.75356	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05985	0.74986	0.76782	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50479	0.26593	0.76455	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.38714	0.97241	0.27851	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.14074	0.74976	0.01705	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01096	0.73522	0.28515	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.14101	-0.00166	0.76777	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.38530	0.26622	0.99149	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.52789	0.33825	0.04617	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.52971	0.03147	0.34880	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.67749	0.02829	0.04739	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84750	0.97224	0.98920	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	-0.00121	0.98274	0.69651	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	-0.00130	0.67473	-0.00090	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.59475	0.49343	0.85976	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.93308	0.15037	0.51718	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.75989	0.84068	0.16145	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.93246	0.50013	0.17088	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.59225	0.84707	0.51150	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75907	0.14454	0.85960	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63425	0.24075	0.90561	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95798	0.25219	0.26997	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63544	0.88293	0.25929	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88627	0.75143	0.12676	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88554	0.11151	0.76891	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.56311	0.72443	0.74129	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00987	0.26977	0.75193	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.87651	0.00390	0.27544	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.64078	0.74570	-0.00246	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50417	0.74936	0.28170	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63985	-0.01798	0.76389	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87553	0.25846	0.02291	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.47112	0.48319	0.50536	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.37971	0.70955	0.44472	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.38108	0.43613	0.73867	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.37910	0.75474	0.75876	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.40288	0.59757	0.61587	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.46722	0.49703	0.39636	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.52218	0.52150	0.54906	0.00000	Uiso	1.00

H81	H	0.42705	0.74271	0.40072	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.34995	0.64336	0.36364	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.35981	0.46396	0.83377	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.42775	0.38693	0.76490	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.37885	0.73044	0.86456	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.42133	0.83378	0.75564	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.33308	0.80376	0.73400	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.46448	0.37339	0.51495	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.34581	0.35589	0.68335	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.35250	0.79952	0.46198	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (1,4)

```

data_6MR-1-4
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.07010  0.35805  0.90731  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.45845  0.11362  0.35083  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.18494  0.90509  0.14034  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.34620  0.89905  0.13992  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.07830  0.69154  0.92565  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.07925  0.91735  0.69869  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34720  0.12735  0.90813  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.18577  0.13250  0.91175  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.06987  0.89943  0.36637  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.45917  0.34200  0.12137  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.57166  0.34335  0.89801  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.95394  0.12801  0.36371  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.68436  0.88252  0.11884  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.85039  0.91476  0.15196  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.96581  0.14814  0.69546  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.58319  0.67099  0.90544  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.96546  0.68703  0.15601  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.58285  0.89701  0.67824  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.85059  0.14047  0.92359  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.68403  0.11578  0.89607  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.57032  0.88645  0.35155  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.95410  0.35370  0.13534  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.46113  0.11866  0.68308  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.46085  0.67408  0.13059  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.02667  0.34496  0.05023  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.02630  0.04241  0.35710  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.18539  0.05516  0.06209  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.33657  0.98467  0.99515  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.50348  0.95724  0.67974  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.50945  0.68514  0.98066  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.09434  0.52533  0.88543  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.43831  0.16623  0.50965  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.26536  0.86749  0.19378  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.43605  0.49901  0.17197  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.09497  0.87516  0.53275  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.26695  0.18574  0.87664  0.00000  Uiso  1.00

```



O38	O	0.14277	0.27594	0.92859	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.46790	0.25590	0.26403	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.14171	0.92441	0.28296	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.37941	0.75000	0.09912	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.38018	0.08471	0.75952	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.06842	0.76906	0.77683	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.51400	0.26511	0.77295	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.39467	0.00028	0.26752	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.14680	0.77158	0.02892	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.02026	0.75608	0.29404	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.14819	0.01993	0.77856	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.39659	0.25858	0.00399	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.53664	0.35299	0.05283	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.53526	0.04100	0.35703	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.67982	0.03127	0.04085	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85733	0.99241	0.00294	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.00623	0.00041	0.70346	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.00482	0.69742	0.00716	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.59626	0.50484	0.85667	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.94113	0.17435	0.53001	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76763	0.86476	0.17447	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.94197	0.52060	0.18041	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.60090	0.85578	0.51354	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76776	0.15952	0.87045	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.64508	0.26242	0.91780	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.96596	0.27319	0.28162	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63893	0.89384	0.25767	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.89384	0.77187	0.14286	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.89490	0.13135	0.78196	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.58000	0.74664	0.75379	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.02016	0.28695	0.76396	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88387	0.02594	0.28946	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.65424	0.74322	0.00868	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50882	0.75785	0.29032	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64632	0.01379	0.75629	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88366	0.27917	0.03408	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.41690	0.76963	0.49763	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.48907	0.50579	0.52773	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.32366	0.51973	0.39412	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.37149	0.40924	0.69484	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.36364	0.72772	0.75815	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.39603	0.58855	0.59602	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.49391	0.52306	0.42153	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.53405	0.55557	0.58857	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.35709	0.50071	0.31291	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.28723	0.43098	0.39038	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.32530	0.40536	0.74735	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.41330	0.39174	0.76870	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.36202	0.69367	0.86004	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.39929	0.81910	0.77193	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.31443	0.76388	0.73042	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.48836	0.39641	0.53536	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.36688	0.32159	0.61889	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.29541	0.60431	0.36586	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.44754	0.75669	0.41476	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.44706	0.84275	0.56754	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (2,4)

```

data_6MR-2-4
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629

```

```

_cell_angle_gamma      94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.07516  0.36255  0.92299  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.46439  0.12168  0.36032  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.19092  0.90902  0.15754  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.35179  0.90717  0.14699  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.08454  0.69640  0.94386  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.08465  0.92399  0.71639  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.35157  0.12756  0.92107  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.19098  0.13879  0.92996  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.07560  0.90423  0.38369  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.46439  0.34463  0.13562  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.57771  0.34501  0.90900  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.95972  0.13181  0.37913  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.68859  0.88247  0.13325  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.85628  0.91959  0.16611  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.97141  0.15315  0.71103  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.59005  0.67248  0.92067  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.97074  0.69191  0.17303  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.58658  0.90391  0.69162  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.85549  0.14564  0.93911  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.68725  0.11907  0.90603  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.57543  0.88681  0.36352  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.95789  0.35816  0.15049  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.46573  0.12086  0.69375  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.46615  0.67477  0.13878  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.02965  0.34903  0.06291  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.03313  0.04867  0.37363  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.18888  0.05819  0.07850  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.33653 -0.02520 -0.00748  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.50520  0.95413  0.69023  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.51316  0.68594 -0.01437  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.09921  0.52997  0.90088  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.44113  0.16508  0.51876  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.27228  0.87589  0.21038  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.43579  0.49988  0.17431  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.10047  0.88002  0.55047  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.27215  0.19273  0.89722  0.00000  Uiso  1.00
O38  O   0.14800  0.28222  0.94989  0.00000  Uiso  1.00
O39  O   0.48156  0.27193  0.28671  0.00000  Uiso  1.00
O40  O   0.14814  0.92601  0.30140  0.00000  Uiso  1.00
O41  O   0.38636  0.75807  0.12211  0.00000  Uiso  1.00
O42  O   0.38335  0.09960  0.76893  0.00000  Uiso  1.00
O43  O   0.07575  0.77642  0.79634  0.00000  Uiso  1.00
O44  O   0.52615  0.25606  0.78180  0.00000  Uiso  1.00
O45  O   0.39912  0.02434  0.26211  0.00000  Uiso  1.00
O46  O   0.15360  0.77288  0.04819  0.00000  Uiso  1.00
O47  O   0.02499  0.76194  0.31176  0.00000  Uiso  1.00
O48  O   0.15294  0.02984  0.79390  0.00000  Uiso  1.00
O49  O   0.40277  0.24136  0.03333  0.00000  Uiso  1.00
O50  O   0.53971  0.36111  0.06024  0.00000  Uiso  1.00
O51  O   0.53775  0.03821  0.36691  0.00000  Uiso  1.00
O52  O   0.67990  0.02059  0.04062  0.00000  Uiso  1.00
O53  O   0.86563  0.99857  0.01861  0.00000  Uiso  1.00
O54  O   0.01064  0.00384  0.72005  0.00000  Uiso  1.00
O55  O   0.01114  0.70294  0.02535  0.00000  Uiso  1.00
O56  O   0.60217  0.50689  0.86478  0.00000  Uiso  1.00
O57  O   0.94668  0.17830  0.54529  0.00000  Uiso  1.00
O58  O   0.77309  0.87266  0.18577  0.00000  Uiso  1.00
O59  O   0.94748  0.52549  0.19776  0.00000  Uiso  1.00
O60  O   0.60350  0.85391  0.52687  0.00000  Uiso  1.00
O61  O   0.77227  0.15787  0.88519  0.00000  Uiso  1.00
O62  O   0.65255  0.26910  0.94182  0.00000  Uiso  1.00
O63  O   0.97080  0.27666  0.29603  0.00000  Uiso  1.00
O64  O   0.64640  0.90492  0.27602  0.00000  Uiso  1.00
O65  O   0.89876  0.77523  0.15735  0.00000  Uiso  1.00
O66  O   0.90075  0.14096  0.79849  0.00000  Uiso  1.00

```

O67	O	0.59363	0.76159	0.77847	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.02746	0.29036	0.77738	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.89025	0.02792	0.30559	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.65802	0.73324	0.03824	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51807	0.75292	0.29731	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64810	0.03202	0.75834	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88653	0.28556	0.05067	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.43829	0.54904	0.70456	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.41827	0.76568	0.50011	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.54033	0.50961	0.54781	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.31349	0.57071	0.34862	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.32906	0.36579	0.57219	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.30179	0.72805	0.69274	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.36185	0.57864	0.55310	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.45143	0.62297	0.78557	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.55491	0.59767	0.49418	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.58415	0.48803	0.61356	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.35035	0.53654	0.27821	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.26700	0.50341	0.32670	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.28157	0.32363	0.51566	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.32404	0.35313	0.67924	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.31257	0.71878	0.80104	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.31998	0.83232	0.67793	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.48731	0.53420	0.63701	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.24675	0.72093	0.67309	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.52570	0.42302	0.47267	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.36898	0.30020	0.54301	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.30199	0.67166	0.32223	0.00000	Uiso	1.00
H95	H	0.45215	0.75170	0.42395	0.00000	Uiso	1.00
H96	H	0.44759	0.82691	0.58112	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (0,5)

```

data_6MR-0-5
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.06923  0.34426  0.91016  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.45520  0.10023  0.34893  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.18318  0.88819  0.13671  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.34675  0.88764  0.13661  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.07548  0.67505  0.92209  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.07571  0.90232  0.69599  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34651  0.11954  0.90376  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.18333  0.11707  0.90938  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.06962  0.89000  0.36453  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.45606  0.33144  0.11661  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.56852  0.34137  0.89375  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.95541  0.11713  0.36490  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.68325  0.88291  0.12586  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.84912  0.90445  0.15228  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.96239  0.13202  0.69622  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.58405  0.66589  0.90916  0.00000  Uiso  1.00

```

Si18	Si	0.96236	0.67627	0.15218	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.58304	0.89320	0.68575	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.84892	0.13325	0.92404	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.68301	0.10711	0.90208	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.56796	0.87285	0.35707	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.95494	0.34552	0.13738	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.46145	0.12635	0.68077	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.46192	0.66134	0.13853	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.02983	0.34127	0.05881	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.03059	0.03901	0.36008	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.18282	0.03813	0.05907	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.34005	0.97693	-0.00586	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.51041	0.97485	0.69458	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.51047	0.66863	0.98775	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.09276	0.50989	0.87914	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43530	0.15982	0.50479	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.26424	0.84852	0.18351	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.43272	0.48626	0.17514	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.09327	0.85996	0.53054	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.26398	0.16548	0.87108	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.14221	0.26270	0.92957	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.46306	0.23263	0.24954	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.14339	0.90715	0.28447	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.38147	0.74048	0.09959	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37928	0.07810	0.75410	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.06653	0.75380	0.77393	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50776	0.28258	0.76616	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.38800	0.98389	0.27687	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.14322	0.75489	0.02790	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01706	0.75349	0.28704	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.14372	0.00727	0.77591	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.39221	0.25566	0.99660	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.53366	0.34582	0.04933	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.53074	0.02499	0.35378	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.68084	0.03701	0.05614	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85550	0.98702	0.00626	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.00193	0.98246	0.69999	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.00175	0.67929	0.00247	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.60306	0.50213	0.86720	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.94164	0.16390	0.53073	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76661	0.86077	0.18025	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.94127	0.51122	0.18515	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.60005	0.85217	0.52063	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.76644	0.16151	0.88028	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.63661	0.24398	0.90456	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.96440	0.26236	0.28227	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63751	0.88459	0.26385	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.88996	0.75797	0.13400	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88985	0.11481	0.77766	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.57088	0.73931	0.75685	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.01692	0.26707	0.77306	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88809	0.00796	0.29113	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.65374	0.75125	0.00576	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51015	0.73940	0.29734	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.65393	0.98752	0.76947	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88758	0.27180	0.02832	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.31088	0.83985	0.53605	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.45875	0.55049	0.53276	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.32230	0.56706	0.35959	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.30107	0.47765	0.67734	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.40539	0.74664	0.75792	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.36512	0.65320	0.56172	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.32772	0.92061	0.61782	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.32338	0.88248	0.44203	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.47876	0.58404	0.43996	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.49859	0.58132	0.61496	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.29901	0.64095	0.29917	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.36055	0.52381	0.29749	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.25688	0.41678	0.62509	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.28449	0.51909	0.77301	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.36697	0.78580	0.81929	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.43503	0.68501	0.82325	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.25565	0.82431	0.53067	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.44056	0.83512	0.74268	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.45201	0.43943	0.52226	0.00000	Uiso	1.00

H93	H	0.33714	0.40514	0.70489	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.28301	0.48569	0.36850	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (1,5)

```

data_6MR-1-5
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.07270  0.35956  0.90786  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.45941  0.12096  0.34548  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.18747  0.90549  0.14179  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.34769  0.90313  0.13586  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.08184  0.69326  0.92747  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.08210  0.91937  0.70015  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.34916  0.11830  0.90606  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.18837  0.13310  0.91408  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.07143  0.90143  0.36838  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.46336  0.33751  0.11767  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.57144  0.34849  0.88725  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.95699  0.12965  0.36379  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.68620  0.89339  0.11668  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.85221  0.91697  0.14967  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.96815  0.15014  0.69537  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.58603  0.67647  0.90165  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.96668  0.69009  0.15648  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.58534  0.90142  0.67560  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.85248  0.14514  0.92234  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.68640  0.11724  0.89042  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.57146  0.88538  0.34772  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.95675  0.35645  0.13531  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.46153  0.13012  0.67785  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.46353  0.67187  0.12799  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.02999  0.34802  0.05188  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.03114  0.04858  0.36093  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.18553  0.05590  0.06452  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.33194  0.96676  0.97862  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.51087  0.97775  0.68108  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.51166  0.68602  0.97704  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.09689  0.52683  0.88523  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.43551  0.16778  0.50255  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.26821  0.87221  0.19915  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.43479  0.49383  0.15286  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.09772  0.87497  0.53411  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.27006  0.18547  0.88249  0.00000  Uiso  1.00
O38  O   0.14531  0.27689  0.92827  0.00000  Uiso  1.00
O39  O   0.47772  0.26949  0.27047  0.00000  Uiso  1.00
O40  O   0.14322  0.91893  0.28363  0.00000  Uiso  1.00
O41  O   0.38338  0.75467  0.11216  0.00000  Uiso  1.00
O42  O   0.38148  0.08119  0.75531  0.00000  Uiso  1.00
O43  O   0.07132  0.77154  0.77910  0.00000  Uiso  1.00
O44  O   0.50916  0.28612  0.76335  0.00000  Uiso  1.00
O45  O   0.39396  0.02754  0.24336  0.00000  Uiso  1.00

```

O46	O	0.15168	0.77091	0.02876	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01853	0.76190	0.29789	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.15167	0.02104	0.77901	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.40171	0.23562	0.01232	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.53970	0.35058	0.04534	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.53206	0.03484	0.35048	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.68341	0.04533	0.04326	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85894	0.99760	0.00250	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.00945	0.00323	0.70378	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.00937	0.70124	0.01164	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.60236	0.51123	0.85947	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.94340	0.17584	0.52978	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.76916	0.87103	0.17288	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.94466	0.52324	0.18131	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.60257	0.85949	0.51056	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.77021	0.16824	0.86952	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.64162	0.25662	0.89275	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.96772	0.27473	0.28106	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.64059	0.90123	0.25502	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.89429	0.77187	0.13592	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.89714	0.13264	0.78110	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.57563	0.74819	0.74805	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.02230	0.28908	0.76486	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.88867	0.02359	0.28856	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.65584	0.75856	0.00065	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51462	0.74938	0.28552	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.65524	-0.00008	0.75736	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88694	0.28355	0.03189	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.41086	0.82320	0.46735	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.27284	0.72915	0.55047	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.46762	0.53667	0.53951	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.32949	0.50527	0.36387	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.34307	0.39618	0.68047	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.39300	0.72246	0.76128	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.36420	0.60626	0.56577	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.27583	0.80682	0.63567	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.27949	0.78425	0.46083	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.48263	0.55798	0.43942	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.50685	0.59036	0.61312	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.36999	0.49734	0.29392	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.30764	0.40234	0.37301	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.30047	0.36825	0.73821	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.38831	0.40106	0.75194	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.35572	0.70555	0.83451	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.44154	0.70323	0.81473	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.22165	0.67845	0.54078	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.39670	0.83186	0.75098	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.46979	0.42774	0.54702	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.34789	0.30783	0.60970	0.00000	Uiso	1.00
H95	H	0.29062	0.55816	0.31131	0.00000	Uiso	1.00
H96	H	0.44235	0.79102	0.39334	0.00000	Uiso	1.00
H97	H	0.44544	0.87067	0.54618	0.00000	Uiso	1.00

## 6MR (0,6)

```

data_6MR-0-6
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol

```

```

_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2 Si 0.07607 0.37687 0.91809 0.00000 Uiso 1.00
Si3 Si 0.46279 0.12718 0.35604 0.00000 Uiso 1.00
Si4 Si 0.18995 0.92454 0.15123 0.00000 Uiso 1.00
Si5 Si 0.34969 0.91039 0.14204 0.00000 Uiso 1.00
Si6 Si 0.08354 0.71096 0.93528 0.00000 Uiso 1.00
Si7 Si 0.08314 0.93780 0.70955 0.00000 Uiso 1.00
Si8 Si 0.35107 0.13121 0.91386 0.00000 Uiso 1.00
Si9 Si 0.19110 0.15133 0.92155 0.00000 Uiso 1.00
Si10 Si 0.07393 0.91980 0.37376 0.00000 Uiso 1.00
Si11 Si 0.46440 0.34854 0.12789 0.00000 Uiso 1.00
Si12 Si 0.57382 0.35465 0.89920 0.00000 Uiso 1.00
Si13 Si 0.95756 0.14712 0.37070 0.00000 Uiso 1.00
Si14 Si 0.68696 0.89825 0.12621 0.00000 Uiso 1.00
Si15 Si 0.85542 0.93550 0.15851 0.00000 Uiso 1.00
Si16 Si 0.97074 0.16736 0.70551 0.00000 Uiso 1.00
Si17 Si 0.58723 0.68361 0.91305 0.00000 Uiso 1.00
Si18 Si 0.97077 0.70713 0.16393 0.00000 Uiso 1.00
Si19 Si 0.59022 0.91124 0.68282 0.00000 Uiso 1.00
Si20 Si 0.85611 0.16109 0.93228 0.00000 Uiso 1.00
Si21 Si 0.68797 0.12521 0.89242 0.00000 Uiso 1.00
Si22 Si 0.57533 0.89879 0.35429 0.00000 Uiso 1.00
Si23 Si 0.95942 0.37383 0.14394 0.00000 Uiso 1.00
Al24 Al 0.46546 0.13104 0.68905 0.00000 Uiso 1.00
Al25 Al 0.46458 0.68319 0.12967 0.00000 Uiso 1.00
O26 O 0.03279 0.36377 0.06128 0.00000 Uiso 1.00
O27 O 0.02933 0.06014 0.35765 0.00000 Uiso 1.00
O28 O 0.18969 0.07386 0.07200 0.00000 Uiso 1.00
O29 O 0.33501 0.98177 0.98966 0.00000 Uiso 1.00
O30 O 0.51400 -0.02065 0.69575 0.00000 Uiso 1.00
O31 O 0.50858 0.69437 0.97200 0.00000 Uiso 1.00
O32 O 0.09930 0.54455 0.89555 0.00000 Uiso 1.00
O33 O 0.43677 0.16474 0.51321 0.00000 Uiso 1.00
O34 O 0.27042 0.88849 0.20723 0.00000 Uiso 1.00
O35 O 0.43892 0.50647 0.16306 0.00000 Uiso 1.00
O36 O 0.09675 0.89825 0.54180 0.00000 Uiso 1.00
O37 O 0.27275 0.19947 0.88537 0.00000 Uiso 1.00
O38 O 0.14949 0.29676 0.93895 0.00000 Uiso 1.00
O39 O 0.47553 0.27694 0.28041 0.00000 Uiso 1.00
O40 O 0.14787 0.94459 0.29612 0.00000 Uiso 1.00
O41 O 0.38199 0.75878 0.11435 0.00000 Uiso 1.00
O42 O 0.38437 0.09138 0.76503 0.00000 Uiso 1.00
O43 O 0.07535 0.78755 0.78540 0.00000 Uiso 1.00
O44 O 0.51316 0.28835 0.77280 0.00000 Uiso 1.00
O45 O 0.40034 0.02124 0.25800 0.00000 Uiso 1.00
O46 O 0.15134 0.79071 0.04094 0.00000 Uiso 1.00
O47 O 0.02697 0.77370 0.30103 0.00000 Uiso 1.00
O48 O 0.15201 0.04133 0.78753 0.00000 Uiso 1.00
O49 O 0.40255 0.24980 0.02060 0.00000 Uiso 1.00
O50 O 0.54121 0.35530 0.05641 0.00000 Uiso 1.00
O51 O 0.53845 0.05165 0.36567 0.00000 Uiso 1.00
O52 O 0.67778 0.03607 0.03284 0.00000 Uiso 1.00
O53 O 0.86658 0.01364 0.01099 0.00000 Uiso 1.00
O54 O 0.00952 0.01799 0.71857 0.00000 Uiso 1.00
O55 O 0.00926 0.71841 0.01398 0.00000 Uiso 1.00
O56 O 0.60116 0.51760 0.86632 0.00000 Uiso 1.00
O57 O 0.94815 0.19170 0.53879 0.00000 Uiso 1.00
O58 O 0.77196 0.88453 0.17124 0.00000 Uiso 1.00
O59 O 0.94735 0.54087 0.18797 0.00000 Uiso 1.00
O60 O 0.60004 0.85661 0.51609 0.00000 Uiso 1.00
O61 O 0.77264 0.17777 0.88548 0.00000 Uiso 1.00
O62 O 0.64528 0.26733 0.90727 0.00000 Uiso 1.00
O63 O 0.96948 0.29368 0.29081 0.00000 Uiso 1.00
O64 O 0.64836 0.92392 0.27322 0.00000 Uiso 1.00
O65 O 0.89965 0.79345 0.15472 0.00000 Uiso 1.00
O66 O 0.89835 0.15467 0.78771 0.00000 Uiso 1.00
O67 O 0.59129 0.76629 0.76736 0.00000 Uiso 1.00
O68 O 0.02609 0.30444 0.77508 0.00000 Uiso 1.00
O69 O 0.88627 0.04698 0.29845 0.00000 Uiso 1.00
O70 O 0.65271 0.75028 0.03337 0.00000 Uiso 1.00

```

O71	O	0.51894	0.77024	0.27725	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.65929	0.02494	0.74480	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.88943	0.30075	0.04103	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.23348	0.72816	0.50331	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.49962	0.53109	0.54231	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.32927	0.51363	0.39014	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.37096	0.41285	0.67665	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.38535	0.72424	0.77472	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.41192	0.78450	0.49034	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.39234	0.59802	0.58104	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.18228	0.70835	0.53322	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.26630	0.75233	0.59725	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.49602	0.47549	0.44201	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.53929	0.61425	0.54459	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.35679	0.52476	0.29974	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.30987	0.40751	0.38690	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.32267	0.39731	0.72065	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.41131	0.40452	0.75685	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.34763	0.68933	0.84097	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.43449	0.72352	0.83578	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.23284	0.82115	0.45210	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.37861	0.83146	0.76515	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.51739	0.46183	0.61471	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.37449	0.32608	0.60225	0.00000	Uiso	1.00
H95	H	0.28599	0.57669	0.39056	0.00000	Uiso	1.00
H96	H	0.36655	0.83146	0.45652	0.00000	Uiso	1.00
H97	H	0.44316	0.85692	0.56483	0.00000	Uiso	1.00
H98	H	0.44215	0.76978	0.40330	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (0,0)

```

data_8MR-0-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Al2  Al  0.05577  0.35412  0.87098  0.00000  Uiso  1.00
Al3  Al  0.93014  0.09915  0.32400  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.43859  0.10190  0.32833  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.16758  0.89659  0.11152  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.33187  0.88952  0.11856  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.44829  0.12098  0.66249  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.05669  0.68386  0.89350  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.06211  0.90353  0.67092  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.33542  0.11416  0.88833  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.17064  0.11040  0.87990  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.05540  0.87996  0.33491  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.44198  0.32893  0.10251  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.55324  0.33247  0.87272  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.66435  0.87594  0.09938  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.82776  0.89165  0.11773  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.94765  0.14166  0.67389  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.55561  0.66286  0.88453  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.94913  0.67100  0.12863  0.00000  Uiso  1.00

```



Si20	Si	0.56451	0.89087	0.66080	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.83454	0.12500	0.91309	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.66912	0.10313	0.87286	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.55429	0.87375	0.32600	0.00000	Uiso	1.00
Si24	Si	0.94009	0.34271	0.11955	0.00000	Uiso	1.00
Si25	Si	0.44610	0.66034	0.11427	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.00371	0.32751	0.01583	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00664	0.01225	0.31811	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.17199	0.05042	0.04051	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33784	0.96569	0.96858	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.49456	0.98175	0.67479	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.47924	0.66416	0.95770	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.08298	0.52946	0.85039	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42627	0.14512	0.49548	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24820	0.84529	0.14312	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42551	0.49426	0.14532	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07467	0.85809	0.50467	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.25356	0.14931	0.84463	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12554	0.24716	0.87377	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.44992	0.24946	0.24996	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.13129	0.91002	0.26383	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.37334	0.74353	0.10991	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37515	0.09238	0.74112	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.03752	0.75958	0.74535	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.49593	0.26517	0.73858	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36801	0.00074	0.25398	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.11925	0.77889	0.99932	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.01084	0.73001	0.25909	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.13546	0.98397	0.75515	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37562	0.24979	0.99350	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51730	0.32380	0.02553	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51096	0.01722	0.31680	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.66447	0.02734	0.02342	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83533	0.96219	0.96319	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.99507	0.00666	0.68096	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98164	0.67337	0.97307	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57615	0.49917	0.84694	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91519	0.15948	0.50643	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74517	0.82675	0.12703	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92114	0.50698	0.15787	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57524	0.84626	0.49297	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.75326	0.15603	0.85538	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.62488	0.24522	0.87820	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.95785	0.28207	0.28335	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62937	0.89947	0.25187	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87898	0.76080	0.12721	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.88388	0.13551	0.77766	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.55018	0.74234	0.73675	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99861	0.29833	0.69819	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85039	0.01594	0.24709	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61899	0.74626	0.99663	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50512	0.73434	0.24340	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63685	0.98768	0.73709	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86733	0.24453	0.04486	0.00000	Uiso	1.00
Cu74	Cu	0.98049	0.33663	0.49304	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (1,0)

```

data_8MR-1-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a             18.6712
_cell_length_b             9.3357
_cell_length_c             9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2 Si 0.05369 0.35950 0.89267 0.00000 Uiso 1.00
Si3 Si 0.44899 0.08983 0.31213 0.00000 Uiso 1.00
Si4 Si 0.16882 0.90816 0.12986 0.00000 Uiso 1.00
Si5 Si 0.32669 0.88039 0.11093 0.00000 Uiso 1.00
Si6 Si 0.44610 0.10492 0.64271 0.00000 Uiso 1.00
Si7 Si 0.06287 0.69467 0.91488 0.00000 Uiso 1.00
Si8 Si 0.06454 0.92251 0.68663 0.00000 Uiso 1.00
Si9 Si 0.17029 0.13609 0.89866 0.00000 Uiso 1.00
Si10 Si 0.05265 0.89769 0.35091 0.00000 Uiso 1.00
Si11 Si 0.44971 0.30932 0.09011 0.00000 Uiso 1.00
Si12 Si 0.55217 0.32392 0.85012 0.00000 Uiso 1.00
Si13 Si 0.93290 0.12189 0.34487 0.00000 Uiso 1.00
Si14 Si 0.66345 0.86397 0.08324 0.00000 Uiso 1.00
Si15 Si 0.83437 0.91320 0.13174 0.00000 Uiso 1.00
Si16 Si 0.95000 0.15059 0.68023 0.00000 Uiso 1.00
Si17 Si 0.56015 0.65384 0.87332 0.00000 Uiso 1.00
Si18 Si 0.95036 0.68509 0.14321 0.00000 Uiso 1.00
Si19 Si 0.56764 0.88042 0.64855 0.00000 Uiso 1.00
Si20 Si 0.83570 0.13755 0.90811 0.00000 Uiso 1.00
Si21 Si 0.66509 0.09012 0.86476 0.00000 Uiso 1.00
Si22 Si 0.55334 0.84892 0.31905 0.00000 Uiso 1.00
Si23 Si 0.93594 0.35123 0.11755 0.00000 Uiso 1.00
Al24 Al 0.33087 0.08016 0.86418 0.00000 Uiso 1.00
Al25 Al 0.44007 0.64854 0.10707 0.00000 Uiso 1.00
O26 O 0.00908 0.34193 0.03319 0.00000 Uiso 1.00
O27 O 0.00322 0.03110 0.33242 0.00000 Uiso 1.00
O28 O 0.16791 0.05556 0.04651 0.00000 Uiso 1.00
O29 O 0.31238 0.92851 0.94979 0.00000 Uiso 1.00
O30 O 0.49867 0.97541 0.65560 0.00000 Uiso 1.00
O31 O 0.48898 0.66077 0.95849 0.00000 Uiso 1.00
O32 O 0.07998 0.52780 0.87648 0.00000 Uiso 1.00
O33 O 0.42821 0.13184 0.47385 0.00000 Uiso 1.00
O34 O 0.24943 0.87264 0.18401 0.00000 Uiso 1.00
O35 O 0.40828 0.45913 0.10528 0.00000 Uiso 1.00
O36 O 0.07666 0.88009 0.51925 0.00000 Uiso 1.00
O37 O 0.25414 0.18941 0.87163 0.00000 Uiso 1.00
O38 O 0.12827 0.28161 0.91662 0.00000 Uiso 1.00
O39 O 0.46374 0.24339 0.24222 0.00000 Uiso 1.00
O40 O 0.12508 0.93136 0.27121 0.00000 Uiso 1.00
O41 O 0.35433 0.71876 0.09922 0.00000 Uiso 1.00
O42 O 0.37026 0.06544 0.70650 0.00000 Uiso 1.00
O43 O 0.05586 0.77539 0.76771 0.00000 Uiso 1.00
O44 O 0.48848 0.25219 0.72961 0.00000 Uiso 1.00
O45 O 0.38301 -0.00665 0.21520 0.00000 Uiso 1.00
O46 O 0.13100 0.77049 0.02232 0.00000 Uiso 1.00
O47 O 0.00826 0.74792 0.27893 0.00000 Uiso 1.00
O48 O 0.13457 0.02761 0.76111 0.00000 Uiso 1.00
O49 O 0.38426 0.21253 0.98652 0.00000 Uiso 1.00
O50 O 0.52307 0.32435 0.01192 0.00000 Uiso 1.00
O51 O 0.52163 0.00743 0.31111 0.00000 Uiso 1.00
O52 O 0.64938 0.01596 0.01304 0.00000 Uiso 1.00
O53 O 0.85340 0.99444 0.98913 0.00000 Uiso 1.00
O54 O 0.99156 0.00508 0.69739 0.00000 Uiso 1.00
O55 O 0.98805 0.69798 0.99204 0.00000 Uiso 1.00
O56 O 0.57531 0.48825 0.82048 0.00000 Uiso 1.00
O57 O 0.92595 0.17120 0.51327 0.00000 Uiso 1.00
O58 O 0.74983 0.86073 0.12480 0.00000 Uiso 1.00
O59 O 0.92591 0.51853 0.16510 0.00000 Uiso 1.00
O60 O 0.58290 0.83260 0.48473 0.00000 Uiso 1.00
O61 O 0.75059 0.14002 0.86500 0.00000 Uiso 1.00
O62 O 0.62236 0.23316 0.85316 0.00000 Uiso 1.00
O63 O 0.94569 0.26599 0.26109 0.00000 Uiso 1.00
O64 O 0.62448 0.85522 0.22984 0.00000 Uiso 1.00
O65 O 0.87949 0.77246 0.13704 0.00000 Uiso 1.00
O66 O 0.87764 0.13689 0.76293 0.00000 Uiso 1.00
O67 O 0.55012 0.73624 0.72768 0.00000 Uiso 1.00

```

O68	O	0.00489	0.29047	0.74722	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85979	0.02399	0.27609	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63411	0.72658	0.96918	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49275	0.72036	0.26074	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64044	0.97470	0.72604	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86515	0.28247	0.01375	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.26415	0.52257	0.97011	0.00000	Uiso	1.00
Cu75	Cu	0.31740	0.35941	0.98487	0.00000	Uiso	1.00
H76	H	0.21223	0.52003	-0.02199	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.29392	0.61158	0.02788	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (2,0)

```

data_8MR-2-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05291  0.35787  0.88279  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.44351  0.08455  0.30650  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16749  0.90886  0.11723  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32519  0.87440  0.10856  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44468  0.10610  0.64131  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05925  0.69395  0.89964  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.06405  0.91912  0.67553  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.17195  0.13339  0.88596  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05120  0.89817  0.33802  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.45063  0.29900  0.08568  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55082  0.32458  0.84776  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.92946  0.11910  0.33441  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66078  0.86698  0.08252  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.83173  0.90941  0.12191  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.94869  0.14983  0.67096  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55416  0.64920  0.86870  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94941  0.68375  0.13153  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56627  0.88052  0.64658  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.83451  0.13551  0.89785  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66425  0.08828  0.85653  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55393  0.84131  0.31223  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93608  0.34883  0.10700  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.33296  0.07549  0.86406  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.44048  0.63828  0.10590  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.01033  0.33682  0.02635  0.00000  Uiso  1.00
O27  O  -0.00073  0.02756  0.31924  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.17466  0.06488  0.04367  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.31258  0.92097  0.94549  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.50088  0.98395  0.66124  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.47588  0.63562  0.93511  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.07748  0.52709  0.86863  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.43033  0.13326  0.47224  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.24501  0.85864  0.17151  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.40749  0.44890  0.10881  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.07628  0.88371  0.50674  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.25600  0.18769  0.86052  0.00000  Uiso  1.00

```

O38	O	0.12617	0.27413	0.89658	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.46684	0.23685	0.24015	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.12304	0.93653	0.25755	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36246	0.72538	0.11289	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36796	0.06373	0.69923	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05050	0.76756	0.74781	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48237	0.25962	0.73066	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37025	0.00550	0.21852	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12496	0.78421	0.00211	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00856	0.74663	0.26554	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.13601	0.01397	0.75759	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.39411	0.19206	0.97996	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.52540	0.33189	0.01200	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.50887	-0.01724	0.29649	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.64877	0.01624	0.00592	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85028	0.99202	0.97991	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.99349	0.00870	0.68924	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98454	0.69759	0.97804	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57576	0.48808	0.81419	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92396	0.16793	0.50348	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74716	0.85197	0.10982	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92610	0.51652	0.15348	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57714	0.82894	0.48173	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74915	0.14272	0.85695	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61807	0.22666	0.83980	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94242	0.26357	0.25117	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62895	0.87555	0.23810	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87809	0.77057	0.12968	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87572	0.12954	0.75174	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54656	0.73762	0.72703	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00059	0.29312	0.73932	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85569	0.02175	0.26616	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62028	0.72820	0.98127	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50790	0.69651	0.24026	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64162	0.96824	0.72011	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86588	0.28088	0.00058	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.26389	0.34430	0.14462	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.36568	0.44497	0.80567	0.00000	Uiso	1.00
Cu76	Cu	0.31800	0.37176	0.97189	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.23950	0.24651	0.14647	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.29787	0.36447	0.23097	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.39348	0.36870	0.76319	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.40457	0.52584	0.84040	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (3,0)

```

data_8MR-3-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a             18.6712
_cell_length_b             9.3357
_cell_length_c             9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05263  0.34158  0.88000  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43995  0.07765  0.31546  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16594  0.88821  0.10852  0.00000  Uiso  1.00

```

Si5	Si	0.32869	0.87051	0.11862	0.00000	Uiso	1.00
Si6	Si	0.44846	0.11827	0.64379	0.00000	Uiso	1.00
Si7	Si	0.05695	0.67343	0.89069	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.05706	0.89907	0.66689	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.16793	0.11150	0.87798	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.05076	0.88545	0.33064	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.44618	0.31035	0.09341	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.55113	0.33456	0.85299	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.93308	0.11015	0.32959	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.66153	0.88079	0.09468	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.83127	0.90240	0.11546	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.94514	0.13307	0.66508	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.55422	0.65978	0.88162	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94545	0.67075	0.12094	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.56845	0.88706	0.65665	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.83321	0.13203	0.89131	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.66498	0.09874	0.86680	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.55877	0.84645	0.32776	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.93724	0.34283	0.10457	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.33304	0.08298	0.86874	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44712	0.63980	0.12729	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01335	0.34005	0.02895	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00523	0.02524	0.31581	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.16923	0.04072	0.03294	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.32911	0.93212	0.96156	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.50579	0.99763	0.65712	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.47688	0.63812	0.94996	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.08129	0.50893	0.85527	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43041	0.14959	0.47648	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24416	0.83795	0.15400	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.41889	0.46047	0.15718	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07122	0.86229	0.49926	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24896	0.15835	0.84106	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12527	0.25776	0.89404	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.46332	0.20644	0.21795	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.12458	0.91221	0.25387	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36903	0.72665	0.12889	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37557	0.07083	0.71265	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04593	0.74658	0.73935	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48576	0.27448	0.72747	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36319	0.99658	0.24585	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12172	0.76211	-0.00445	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00349	0.74183	0.25235	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12643	-0.00293	0.75045	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37659	0.23968	0.97912	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51861	0.33069	0.00926	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.50454	-0.02596	0.32077	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65360	0.03253	0.02044	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84586	0.98751	0.97336	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98506	-0.01488	0.67859	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98192	0.66704	0.96717	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57867	0.49990	0.82925	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92552	0.15958	0.49778	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74664	0.85270	0.11731	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92215	0.50697	0.15518	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58493	0.83105	0.49591	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74904	0.15494	0.85885	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61801	0.23536	0.84779	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94338	0.25472	0.24621	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63129	0.89763	0.25155	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87482	0.75902	0.10795	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87036	0.11745	0.74035	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54315	0.74849	0.74009	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.00179	0.27135	0.74247	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86142	0.00759	0.26094	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61847	0.74521	0.99346	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51930	0.69886	0.25049	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64275	0.97190	0.73716	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.87087	0.27411	-0.00960	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.27425	0.38778	0.13141	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.24233	0.53074	0.87612	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.37596	0.46724	0.78940	0.00000	Uiso	1.00
Cu77	Cu	0.31032	0.38761	0.92919	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.18960	0.50842	0.87400	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.25278	0.57428	0.78786	0.00000	Uiso	1.00

H80	H	0.26487	0.28948	0.15882	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.32293	0.42521	0.18026	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.40609	0.39285	0.75086	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.41334	0.54326	0.84504	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (4,0)

```

data_8MR-4-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04657  0.32535  0.88198  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43612  0.07213  0.33198  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16156  0.87062  0.11180  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32573  0.87036  0.12969  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44301  0.09866  0.66013  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05357  0.65526  0.89696  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.05170  0.88111  0.67156  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16158  0.09530  0.88067  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04638  0.86441  0.33777  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43338  0.31218  0.10193  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54534  0.31509  0.87661  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93104  0.09494  0.33550  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66134  0.85778  0.10205  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82703  0.88341  0.12308  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93950  0.11466  0.66937  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55533  0.64322  0.88955  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94142  0.65187  0.12925  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56309  0.87092  0.66572  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82704  0.11076  0.89699  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66194  0.08500  0.88330  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55125  0.85799  0.34042  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93305  0.32444  0.11154  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32644  0.10225  0.88391  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.44265  0.64008  0.13456  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.00730  0.32799  0.03101  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.00230  0.00641  0.32575  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.16291  0.02018  0.03393  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.32809  0.96554  -0.00395  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.49387  0.96550  0.66446  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.48409  0.64442  0.97438  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.07452  0.49117  0.85314  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.42200  0.13540  0.49468  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.24190  0.82928  0.16310  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.41622  0.46636  0.17259  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.06832  0.84078  0.50565  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.23979  0.14449  0.83596  0.00000  Uiso  1.00
O38  O   0.11638  0.23631  0.89971  0.00000  Uiso  1.00
O39  O   0.43205  0.19610  0.22176  0.00000  Uiso  1.00
O40  O   0.11901  0.88819  0.25607  0.00000  Uiso  1.00
O41  O   0.35904  0.71630  0.08300  0.00000  Uiso  1.00
O42  O   0.37133  0.04597  0.73497  0.00000  Uiso  1.00
O43  O   0.04088  0.73065  0.74730  0.00000  Uiso  1.00

```

O44	O	0.48483	0.24462	0.74788	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37168	0.94419	0.27723	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12192	0.73832	-0.00115	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	-0.00225	0.72035	0.26453	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12093	-0.02175	0.75370	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.36954	0.26646	-0.03142	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51128	0.31482	0.03203	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51597	0.01353	0.33782	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65919	0.01477	0.03684	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83255	0.96097	0.97366	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97952	-0.03365	0.67922	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98048	0.65273	0.97901	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57270	0.47793	0.84308	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91913	0.14120	0.50234	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74482	0.82859	0.14467	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91519	0.48796	0.15833	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58324	0.83245	0.50342	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74419	0.14229	0.85904	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61443	0.22132	0.88151	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94463	0.24134	0.25597	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62082	0.86416	0.24725	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87226	0.74305	0.11351	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86580	0.09673	0.74798	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.53955	0.72460	0.74155	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.00834	0.25392	0.74543	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85994	-0.00374	0.26012	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62618	0.72802	-0.01624	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49078	0.73170	0.28170	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63319	0.96110	0.75435	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86640	0.24565	0.00393	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.27667	0.46957	-0.00798	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.22318	0.60233	0.74878	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.37283	0.74937	0.75607	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.36436	0.45401	0.75209	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.32585	0.61889	0.88304	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.18323	0.55497	0.79451	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.20482	0.68573	0.70689	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.30524	0.38178	-0.01668	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.28818	0.50821	0.09315	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.42419	0.73251	0.75489	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.37088	0.85652	0.76282	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.37546	0.37406	-0.18793	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.33048	0.41303	0.67105	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (5,0)

```

data_8MR-5-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a             18.6712
_cell_length_b             9.3357
_cell_length_c             9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04780  0.32930  0.89428  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43907  0.08038  0.35344  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16001  0.87542  0.13203  0.00000  Uiso  1.00

```

Si5	Si	0.33010	0.87248	0.15163	0.00000	Uiso	1.00
Si6	Si	0.44496	0.09913	0.67848	0.00000	Uiso	1.00
Si7	Si	0.05575	0.66019	0.92057	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.05395	0.88750	0.68954	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.15978	0.09922	0.90227	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.04753	0.86188	0.35947	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.43765	0.31868	0.12395	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.55165	0.31712	0.89985	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.93225	0.09321	0.35057	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.66179	0.86288	0.12220	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.82925	0.88263	0.13688	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.94155	0.11820	0.68102	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.55306	0.64842	0.90898	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94229	0.65018	0.14870	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.55935	0.87568	0.67971	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.82961	0.10957	0.91134	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.66257	0.09327	0.89820	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.55617	0.86994	0.35620	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.93307	0.32328	0.12447	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.33149	0.10560	0.91127	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44184	0.64768	0.14822	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.00614	0.33007	0.03976	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00374	0.00443	0.35005	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.14651	0.01829	0.04853	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.34409	0.95729	0.00987	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48261	0.94775	0.67103	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.47549	0.65228	0.97598	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07421	0.49631	0.86377	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42610	0.14843	0.51547	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24398	0.85934	0.17517	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42607	0.47436	0.19747	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.06970	0.83281	0.52608	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24218	0.13748	0.88098	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12017	0.24859	0.91583	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.43368	0.20345	0.24348	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.12106	0.88661	0.28124	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35432	0.70943	0.12594	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36979	0.08047	0.74922	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04453	0.74505	0.77739	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.49974	0.22821	0.76750	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37445	-0.04692	0.29910	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12416	0.73214	0.02875	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	-0.00157	0.71951	0.28378	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12150	-0.00408	0.76189	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37212	0.27493	-0.00645	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51433	0.31138	0.05110	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51926	0.02386	0.36007	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65748	0.01234	0.04477	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84017	0.96215	0.98993	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98002	-0.03191	0.68792	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98173	0.65136	0.99900	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56948	0.48288	0.86445	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91930	0.14720	0.51520	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74590	0.83048	0.14960	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91672	0.48601	0.17833	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58175	0.83378	0.51951	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74612	0.12868	0.86773	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.62791	0.24586	0.91747	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94733	0.23465	0.26425	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63052	0.88744	0.27715	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87260	0.73952	0.13121	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86941	0.10212	0.76381	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54955	0.73018	0.76171	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.00409	0.25550	0.75481	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86134	-0.00727	0.27699	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61881	0.72676	0.02223	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49944	0.74621	0.27783	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62239	0.99032	0.76251	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86457	0.24866	0.01887	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.28136	0.49463	-0.03755	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.19374	0.58895	0.73093	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.31132	0.60104	0.56249	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.37333	0.40366	0.74808	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.36724	0.73394	0.80465	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.29497	0.53393	0.76277	0.00000	Uiso	1.00



H80	H	0.15420	0.53602	0.77579	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.17633	0.60446	0.63256	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.30635	0.40820	-0.01148	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.30601	0.58037	0.03026	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.33992	0.54437	0.49954	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.34432	0.68479	0.60860	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.38152	0.35672	-0.15834	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.36468	0.32213	0.67345	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.41203	0.70547	0.85865	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.35483	0.81926	0.86522	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (6,0)

```

data_8MR-6-0
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.03558  0.32417  0.90286  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43297  0.08802  0.36396  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.15280  0.87189  0.13694  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.31803  0.87541  0.15621  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44056  0.10063  0.69707  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.04960  0.65467  0.92432  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.04350  0.87720  0.69884  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.15063  0.09193  0.90734  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.03607  0.85946  0.36908  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.42318  0.31305  0.14082  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.53929  0.31022  0.91297  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.92527  0.09057  0.36212  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.65677  0.86095  0.14256  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82070  0.87474  0.14595  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.92965  0.11394  0.69235  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.54693  0.65512  0.92795  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93353  0.64860  0.16013  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.55056  0.87608  0.70605  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.81805  0.10592  0.92164  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.65434  0.09637  0.92766  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.54664  0.86963  0.37621  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.92516  0.31875  0.13559  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.31773  0.10857  0.92811  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.43657  0.65981  0.16618  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   -0.00054  0.32112  0.05479  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.00018  0.01206  0.36537  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.14900  0.02465  0.06374  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.31701  0.93952  -0.00191  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.47251  0.94407  0.71010  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.47365  0.69012  0.00101  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.06506  0.48877  0.87629  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.41552  0.12228  0.53022  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.23434  0.85245  0.19875  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.42230  0.48029  0.18337  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.06302  0.83385  0.53482  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.22984  0.14362  0.86497  0.00000  Uiso  1.00

```

O38	O	0.10513	0.23263	0.90962	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.43774	0.23754	0.29013	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.10380	0.86665	0.27174	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.34896	0.71875	0.14538	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37026	0.11615	0.78381	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.02675	0.73181	0.77954	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50290	0.23212	0.75673	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36582	0.98047	0.28243	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12325	0.74055	0.01064	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.97819	0.72408	0.30808	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11478	0.96827	0.78218	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.34519	0.25313	0.05586	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.48761	0.27300	0.03834	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51089	0.02267	0.36015	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65782	0.01791	0.07703	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.82293	0.95689	0.99915	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97439	0.97153	0.70113	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98431	0.65658	0.02723	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.55367	0.48245	0.90052	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.90748	0.13837	0.52544	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.73964	0.82410	0.17897	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.90862	0.48265	0.18346	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57429	0.85618	0.54420	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.73545	0.13765	0.88293	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61656	0.24582	0.94909	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93687	0.23525	0.27948	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.61932	0.87195	0.29146	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86295	0.73112	0.12206	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.85700	0.08888	0.77285	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54357	0.71881	0.76965	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.97862	0.25783	0.76773	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85941	0.98115	0.28262	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61791	0.73143	0.02775	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.48799	0.73983	0.31707	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61175	0.98521	0.80116	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.85833	0.24107	0.02777	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.27889	0.49947	-0.01721	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.29628	0.59247	0.55986	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.19458	0.68839	0.75346	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.38287	0.41537	0.74939	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.35872	0.72121	0.82182	0.00000	Uiso	1.00
O79	O	0.21551	0.38168	0.71455	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.29030	0.54734	0.77979	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.30413	0.50556	0.49958	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.34018	0.65774	0.56090	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.30222	0.41111	0.00929	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.30286	0.58163	0.05272	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.19426	0.75076	0.67484	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.18218	0.74599	0.83874	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.37529	0.31120	0.76169	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.42855	0.42817	0.70659	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.40443	0.70482	0.88245	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.33950	0.80395	0.87775	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.22230	0.29403	0.76852	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.17065	0.41766	0.74467	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (0,1)

```

data_8MR-0-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2 Si 0.05328 0.35794 0.89132 0.00000 Uiso 1.00
Si3 Si 0.44772 0.09048 0.31205 0.00000 Uiso 1.00
Si4 Si 0.16853 0.90602 0.12761 0.00000 Uiso 1.00
Si5 Si 0.32711 0.88153 0.11151 0.00000 Uiso 1.00
Si6 Si 0.44655 0.10581 0.64370 0.00000 Uiso 1.00
Si7 Si 0.06151 0.69237 0.91195 0.00000 Uiso 1.00
Si8 Si 0.06392 0.91996 0.68473 0.00000 Uiso 1.00
Si9 Si 0.17019 0.13324 0.89706 0.00000 Uiso 1.00
Si10 Si 0.05263 0.89638 0.34901 0.00000 Uiso 1.00
Si11 Si 0.44963 0.30981 0.09054 0.00000 Uiso 1.00
Si12 Si 0.55235 0.32483 0.85115 0.00000 Uiso 1.00
Si13 Si 0.93281 0.12066 0.34407 0.00000 Uiso 1.00
Si14 Si 0.66339 0.86452 0.08402 0.00000 Uiso 1.00
Si15 Si 0.83425 0.91210 0.13114 0.00000 Uiso 1.00
Si16 Si 0.94929 0.14864 0.67916 0.00000 Uiso 1.00
Si17 Si 0.56020 0.65349 0.87328 0.00000 Uiso 1.00
Si18 Si 0.94997 0.68333 0.14188 0.00000 Uiso 1.00
Si19 Si 0.56808 0.88125 0.64962 0.00000 Uiso 1.00
Si20 Si 0.83577 0.13637 0.90765 0.00000 Uiso 1.00
Si21 Si 0.66521 0.09067 0.86576 0.00000 Uiso 1.00
Si22 Si 0.55355 0.84658 0.31922 0.00000 Uiso 1.00
Si23 Si 0.93650 0.35039 0.11733 0.00000 Uiso 1.00
Al24 Al 0.33134 0.08031 0.86440 0.00000 Uiso 1.00
Al25 Al 0.44132 0.64762 0.10833 0.00000 Uiso 1.00
O26 O 0.01018 0.34288 0.03415 0.00000 Uiso 1.00
O27 O 0.00304 0.02958 0.33160 0.00000 Uiso 1.00
O28 O 0.16866 0.05493 0.04636 0.00000 Uiso 1.00
O29 O 0.31235 0.92848 0.94951 0.00000 Uiso 1.00
O30 O 0.49927 0.97662 0.65756 0.00000 Uiso 1.00
O31 O 0.48866 0.65814 0.95714 0.00000 Uiso 1.00
O32 O 0.07943 0.52597 0.87300 0.00000 Uiso 1.00
O33 O 0.42953 0.13410 0.47521 0.00000 Uiso 1.00
O34 O 0.24843 0.86590 0.18017 0.00000 Uiso 1.00
O35 O 0.40784 0.45908 0.10722 0.00000 Uiso 1.00
O36 O 0.07659 0.87848 0.51742 0.00000 Uiso 1.00
O37 O 0.25368 0.18747 0.86864 0.00000 Uiso 1.00
O38 O 0.12734 0.27804 0.91333 0.00000 Uiso 1.00
O39 O 0.46490 0.24331 0.24214 0.00000 Uiso 1.00
O40 O 0.12511 0.93023 0.26951 0.00000 Uiso 1.00
O41 O 0.35904 0.72580 0.10338 0.00000 Uiso 1.00
O42 O 0.37045 0.06525 0.70625 0.00000 Uiso 1.00
O43 O 0.05401 0.77188 0.76403 0.00000 Uiso 1.00
O44 O 0.48829 0.25321 0.73132 0.00000 Uiso 1.00
O45 O 0.37837 0.00233 0.21792 0.00000 Uiso 1.00
O46 O 0.12912 0.77075 0.01883 0.00000 Uiso 1.00
O47 O 0.00864 0.74656 0.27622 0.00000 Uiso 1.00
O48 O 0.13426 0.02278 0.76107 0.00000 Uiso 1.00
O49 O 0.38428 0.21335 0.98639 0.00000 Uiso 1.00
O50 O 0.52308 0.32646 0.01262 0.00000 Uiso 1.00
O51 O 0.51774 0.00052 0.30710 0.00000 Uiso 1.00
O52 O 0.64962 0.01662 0.01398 0.00000 Uiso 1.00
O53 O 0.85354 0.99329 0.98867 0.00000 Uiso 1.00
O54 O 0.99135 0.00369 0.69557 0.00000 Uiso 1.00
O55 O 0.98675 0.69401 0.98940 0.00000 Uiso 1.00
O56 O 0.57633 0.48851 0.82033 0.00000 Uiso 1.00
O57 O 0.92567 0.17013 0.51230 0.00000 Uiso 1.00
O58 O 0.74981 0.85972 0.12404 0.00000 Uiso 1.00
O59 O 0.92565 0.51714 0.16564 0.00000 Uiso 1.00
O60 O 0.58332 0.83503 0.48565 0.00000 Uiso 1.00
O61 O 0.75072 0.14099 0.86641 0.00000 Uiso 1.00
O62 O 0.62227 0.23327 0.85412 0.00000 Uiso 1.00
O63 O 0.94620 0.26477 0.26058 0.00000 Uiso 1.00
O64 O 0.62529 0.85831 0.23171 0.00000 Uiso 1.00
O65 O 0.87941 0.77144 0.13686 0.00000 Uiso 1.00
O66 O 0.87684 0.13388 0.76129 0.00000 Uiso 1.00
O67 O 0.55044 0.73654 0.72788 0.00000 Uiso 1.00

```

O68	O	0.00357	0.28887	0.74725	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85964	0.02318	0.27529	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.63356	0.72726	0.97044	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49652	0.71208	0.26146	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64105	0.97495	0.72713	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86641	0.28127	0.01214	0.00000	Uiso	1.00
Cu74	Cu	0.31640	0.35923	-0.01345	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.25410	0.51410	-0.01744	0.00000	Uiso	1.00
H76	H	0.21081	0.49962	0.04229	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.28711	0.60689	0.02588	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.23288	0.52824	0.88028	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (1,1)

```

data_8MR-1-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05247  0.35415  0.88142  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.44588  0.08875  0.30671  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16658  0.90325  0.11728  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32604  0.87858  0.10892  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44611  0.10325  0.64061  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05993  0.68854  0.90166  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.06086  0.91589  0.67476  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16894  0.12991  0.88609  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.05088  0.89260  0.33933  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.44660  0.31004  0.08578  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.55074  0.32278  0.84848  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93113  0.11740  0.33363  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66264  0.86795  0.08135  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.83364  0.90969  0.11863  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.94753  0.14525  0.66848  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55686  0.65309  0.86930  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94873  0.67963  0.13230  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56831  0.88091  0.64510  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.83490  0.13542  0.89773  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66458  0.08972  0.85752  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55580  0.85150  0.31135  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93565  0.34776  0.10805  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.33019  0.07798  0.86044  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.44058  0.64631  0.10279  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.00882  0.34031  0.02375  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.00065  0.02477  0.32155  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.16737  0.05157  0.03557  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.31462  0.92535  0.94616  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.50099  0.97916  0.66183  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.47931  0.65304  0.93625  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.07816  0.52233  0.86230  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.43075  0.13068  0.47222  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.24611  0.86271  0.17156  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.41026  0.46174  0.10720  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.07461  0.87512  0.50775  0.00000  Uiso  1.00

```

O37	O	0.25166	0.17923	0.85343	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12699	0.27621	0.90392	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.46140	0.24067	0.23620	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.12281	0.92746	0.25881	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35872	0.72399	0.10474	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37026	0.06231	0.70233	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.05140	0.76733	0.75346	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48542	0.25695	0.72537	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37542	0.99987	0.21846	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12734	0.76808	0.00794	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00711	0.74240	0.26688	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.13011	0.02006	0.75202	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.38227	0.21684	-0.02369	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.52136	0.32033	0.00835	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51651	0.00079	0.29808	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.64812	0.01636	0.00548	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85298	0.99104	0.97629	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98741	-0.00243	0.68386	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98528	0.68906	0.97971	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57414	0.48789	0.82005	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92375	0.16731	0.50168	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74906	0.85555	0.10721	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92393	0.51392	0.15684	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57929	0.83421	0.47961	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74963	0.14220	0.85980	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61984	0.23000	0.84310	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94542	0.26154	0.25070	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63140	0.87513	0.23710	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87853	0.76904	0.12601	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87473	0.13426	0.75015	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.55228	0.73516	0.72308	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00312	0.28319	0.73730	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85769	0.02120	0.26302	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62472	0.72765	0.97967	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50450	0.71394	0.24018	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64251	0.97238	0.71910	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86533	0.27915	0.00332	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.38059	0.45909	0.77095	0.00000	Uiso	1.00
Cu75	Cu	0.31987	0.36967	0.93603	0.00000	Uiso	1.00
H76	H	0.20490	0.49951	0.94806	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.28246	0.60678	0.00325	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.25719	0.56288	0.82828	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.41206	0.38781	0.73280	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.41524	0.53997	0.81883	0.00000	Uiso	1.00
N81	N	0.25751	0.52493	0.92840	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (2,1)

```

data_8MR-2-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.05180  0.34275  0.87920  0.00000  Uiso  1.00

```

Si3	Si	0.44433	0.07650	0.32155	0.00000	Uiso	1.00
Si4	Si	0.16605	0.89149	0.10917	0.00000	Uiso	1.00
Si5	Si	0.32990	0.86836	0.12198	0.00000	Uiso	1.00
Si6	Si	0.44779	0.10989	0.64750	0.00000	Uiso	1.00
Si7	Si	0.05801	0.67655	0.89289	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.05735	0.90221	0.66762	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.16768	0.11602	0.87812	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.05023	0.88480	0.33262	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.44463	0.31211	0.09262	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.55115	0.32576	0.85777	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.93160	0.10957	0.32983	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.66225	0.87144	0.09263	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.83251	0.90149	0.11577	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.94441	0.13296	0.66436	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.55542	0.65204	0.88043	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94687	0.67098	0.12525	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.56835	0.87985	0.65458	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.83387	0.12862	0.89256	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.66444	0.09005	0.86640	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.55955	0.85748	0.32708	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.93687	0.34103	0.10396	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.33310	0.08962	0.87100	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44265	0.64294	0.11755	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01267	0.33663	0.02804	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00274	0.02155	0.31654	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.16806	0.04274	0.03195	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33124	0.94802	0.97581	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.50414	0.98698	0.65944	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.47726	0.63616	0.94564	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07733	0.51043	0.85410	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42989	0.14472	0.48112	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24522	0.84804	0.16106	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42177	0.46495	0.15878	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07298	0.86502	0.50093	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24870	0.16177	0.84137	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12557	0.26261	0.89473	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45063	0.20514	0.21743	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.12257	0.91374	0.25155	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35793	0.70982	0.09991	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37443	0.06268	0.71477	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04711	0.75129	0.74259	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48574	0.26447	0.73317	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37633	0.96175	0.26032	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12585	0.76008	-0.00422	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.00418	0.73749	0.25982	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12585	0.00301	0.75004	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37724	0.25007	0.97073	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51998	0.32232	0.01589	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.52127	0.00868	0.33022	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65017	0.02120	0.01765	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.85014	0.98548	0.97437	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98413	-0.01535	0.67617	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98424	0.67668	0.97330	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57794	0.49040	0.83068	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92418	0.16055	0.49758	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74793	0.84919	0.10988	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92282	0.50588	0.15313	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58243	0.82422	0.49222	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74889	0.14476	0.86325	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61846	0.22823	0.85036	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94305	0.25357	0.24602	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63493	0.88429	0.25211	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87624	0.75887	0.11496	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86975	0.11705	0.74013	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54676	0.73927	0.73776	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.00192	0.27004	0.74166	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85918	0.00897	0.26159	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61979	0.73343	0.99430	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50648	0.72970	0.24416	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64269	0.96738	0.73257	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86991	0.27279	-0.00930	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.27543	0.40109	0.12667	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.37895	0.46657	0.77402	0.00000	Uiso	1.00
Cu76	Cu	0.31134	0.39640	0.91854	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.19390	0.51702	0.87804	0.00000	Uiso	1.00

H78	H	0.26431	0.62822	0.95592	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.25655	0.58550	0.77783	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.26299	0.30386	0.15393	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.32452	0.43351	0.17597	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.40962	0.38953	0.74414	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.41501	0.54288	0.83090	0.00000	Uiso	1.00
N84	N	0.24802	0.54700	0.87525	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (3,1)

```

data_8MR-3-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04102  0.32406  0.88087  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.44110  0.07895  0.32015  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16064  0.86909  0.11214  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32561  0.87095  0.11593  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.43851  0.09668  0.64883  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05552  0.65635  0.89955  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.05421  0.88295  0.67542  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.15850  0.09383  0.88646  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04376  0.86353  0.33924  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43767  0.31523  0.09297  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54657  0.31613  0.86480  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93042  0.08757  0.33210  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.65836  0.85465  0.08983  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82858  0.88044  0.11704  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93871  0.11583  0.66811  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55530  0.64252  0.87492  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93943  0.65166  0.13239  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.55753  0.87364  0.65115  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82749  0.10996  0.89265  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.65752  0.08450  0.87029  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55089  0.85816  0.32453  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.92879  0.32187  0.10656  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32700  0.10535  0.87277  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.43856  0.64376  0.11138  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.00523  0.32143  0.03285  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.00635  0.01335  0.32171  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.15439  0.02151  0.03978  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.32365  0.95229  0.96906  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.48363  0.95403  0.65463  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.48050  0.64569  0.95067  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.07114  0.48927  0.85504  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.42413  0.13406  0.48170  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.24312  0.84596  0.16403  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.41342  0.46969  0.15401  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.06723  0.84464  0.50766  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.23809  0.15884  0.85983  0.00000  Uiso  1.00
O38  O   0.10949  0.22968  0.88769  0.00000  Uiso  1.00
O39  O   0.44180  0.21388  0.22420  0.00000  Uiso  1.00
O40  O   0.11505  0.86738  0.25189  0.00000  Uiso  1.00

```

O41	O	0.35078	0.70897	0.07212	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36144	0.06641	0.71055	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04013	0.73277	0.75093	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48726	0.23321	0.74164	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37710	0.95561	0.24897	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12876	0.73615	-0.00988	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	-0.01245	0.72597	0.27680	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.12792	-0.02996	0.75583	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37547	0.25329	-0.03311	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51522	0.32762	0.02342	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51983	0.01724	0.32307	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.64601	0.00416	0.01605	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84482	0.97095	0.97971	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98582	-0.02192	0.69053	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98678	0.66011	0.99329	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56970	0.47746	0.82204	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92064	0.13564	0.49929	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74406	0.83950	0.12313	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91572	0.48633	0.15944	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57611	0.82821	0.48898	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74305	0.12418	0.85862	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61953	0.23335	0.87806	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93463	0.23110	0.24628	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62440	0.86192	0.24249	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86771	0.73213	0.09926	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86377	0.09116	0.74069	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54780	0.72767	0.73125	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.01546	0.26336	0.74358	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86245	-0.02491	0.26607	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62450	0.71514	0.98297	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.48976	0.73857	0.25251	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62609	0.97956	0.72869	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86325	0.25639	-0.01134	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.27085	0.43919	0.07611	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.25996	0.73846	0.79484	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.36765	0.48805	0.79645	0.00000	Uiso	1.00
Cu77	Cu	0.28211	0.57726	0.92219	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.21008	0.76282	0.79772	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.28991	0.82684	0.84479	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.26558	0.34071	0.02747	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.32172	0.44887	0.12550	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.37609	0.39641	-0.16142	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.41255	0.55158	0.82723	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.22643	0.34070	0.78628	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.16566	0.46280	0.77272	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.23872	0.47329	0.67731	0.00000	Uiso	1.00
N87	N	0.21955	0.44784	0.77259	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (4,1)

```

data_8MR-4-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type

```



\_atom\_site\_occupancy

Si2	Si	0.04318	0.33331	0.91574	0.00000	Uiso	1.00
Si3	Si	0.43838	0.08481	0.34910	0.00000	Uiso	1.00
Si4	Si	0.15941	0.88078	0.15248	0.00000	Uiso	1.00
Si5	Si	0.31919	0.87248	0.14351	0.00000	Uiso	1.00
Si6	Si	0.43777	0.09251	0.68950	0.00000	Uiso	1.00
Si7	Si	0.05338	0.66410	0.93700	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.04704	0.88868	0.70983	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.15606	0.10547	0.92316	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.04311	0.87057	0.37927	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.43153	0.30806	0.13284	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.54087	0.30898	0.90118	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.92606	0.09885	0.37054	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.65712	0.86006	0.12796	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.82627	0.88924	0.15377	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.93780	0.12363	0.70054	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.55071	0.64652	0.91182	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94001	0.65776	0.17065	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.55650	0.87293	0.69050	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.82538	0.11847	0.93275	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.65674	0.08516	0.90445	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.54790	0.86350	0.35255	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.92629	0.32961	0.14479	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.31958	0.09414	0.90990	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.43432	0.64874	0.13836	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	-0.00241	0.32954	0.05559	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	-0.00202	0.01107	0.36918	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.15982	0.03140	0.07552	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.30503	0.92890	0.98434	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48394	0.95403	0.71766	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.47179	0.66689	0.96992	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07142	0.49909	0.89000	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42189	0.10746	0.51733	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24029	0.85030	0.21234	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.41666	0.47203	0.16725	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.06895	0.84728	0.54658	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.23325	0.15538	0.86861	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.11512	0.25185	0.94679	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.44211	0.24299	0.29104	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.11450	0.89483	0.29408	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.34856	0.71435	0.12063	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.35970	0.07578	0.74907	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.03698	0.74049	0.78879	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48514	0.24076	0.76282	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37269	-0.02106	0.26001	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12217	0.74817	0.03715	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.99409	0.72564	0.30994	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11188	0.99398	0.79709	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.36576	0.21939	0.03454	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.50678	0.29210	0.05336	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51593	0.02020	0.33732	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.64768	0.01095	0.05464	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84052	0.97206	0.01008	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97297	0.96906	0.70423	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98174	0.66061	0.02420	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56270	0.47738	0.87859	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91379	0.15279	0.53552	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74222	0.83597	0.15545	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91344	0.49396	0.19931	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.56618	0.84127	0.52205	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74124	0.13029	0.88880	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61500	0.22924	0.90302	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94041	0.24024	0.28406	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62535	0.86924	0.28331	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87045	0.74738	0.15010	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86673	0.11645	0.78716	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54904	0.71627	0.75621	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99584	0.25649	0.77134	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85515	0.99719	0.29778	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61734	0.72427	0.02195	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49129	0.73696	0.27802	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62766	0.96963	0.76811	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.85564	0.25943	0.04246	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.21643	0.38644	0.73663	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.23545	0.65104	0.53043	0.00000	Uiso	1.00

O76	O	0.39422	0.64255	0.71946	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.27452	0.64543	0.86893	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.30395	0.51595	0.70855	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.18796	0.68227	0.54646	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.25421	0.71465	0.46158	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.22630	0.29544	0.78767	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.18605	0.43990	0.79896	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.43244	0.62216	0.65726	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.42024	0.65918	0.82181	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.30165	0.64318	0.96794	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.37419	0.38863	0.50488	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.32895	0.26872	0.59027	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.28557	0.36310	0.47322	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.28220	0.75067	0.85912	0.00000	Uiso	1.00
N90	N	0.32721	0.36969	0.55333	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (5,1)

```

data_8MR-5-1
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.03826  0.31714  0.91920  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43091  0.07815  0.37742  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.15674  0.86217  0.15524  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32023  0.87235  0.17527  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.43498  0.08568  0.70758  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05237  0.64762  0.94136  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.04856  0.87368  0.71419  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.15456  0.08793  0.92501  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.03908  0.85420  0.38187  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.42798  0.31763  0.14854  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54243  0.30614  0.92783  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.92472  0.08370  0.37488  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.65544  0.84562  0.14070  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82142  0.87102  0.15978  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93465  0.10717  0.70672  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55012  0.63468  0.92694  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93583  0.64253  0.17193  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.55371  0.86825  0.69931  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82051  0.10066  0.93427  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.65500  0.08412  0.91629  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.54588  0.86562  0.37254  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.92375  0.31399  0.14933  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32048  0.10882  0.93197  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.43231  0.64496  0.15760  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   -0.00353  0.31651  0.06459  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   -0.00214  0.00030  0.37262  0.00000  Uiso  1.00
O28  O    0.15524  0.01149  0.07637  0.00000  Uiso  1.00
O29  O    0.32034  0.97379  0.04573  0.00000  Uiso  1.00
O30  O    0.47377  0.93218  0.69585  0.00000  Uiso  1.00
O31  O    0.47237  0.64117  -0.00769  0.00000  Uiso  1.00
O32  O    0.06906  0.48169  0.89370  0.00000  Uiso  1.00

```

O33	O	0.41870	0.13652	0.54406	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.23740	0.83656	0.21880	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.41546	0.47567	0.21753	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.06489	0.83000	0.54831	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.23237	0.15039	0.88478	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.10663	0.22487	0.94164	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.42478	0.20954	0.27697	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.10941	0.87222	0.29328	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35048	0.72039	0.12144	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.35994	0.05213	0.77567	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.03610	0.72689	0.79495	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48951	0.21003	0.80137	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36771	-0.05065	0.32208	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12290	0.72694	0.03942	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.98595	0.71344	0.31523	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11853	0.97162	0.79319	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.36669	0.26863	0.01467	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.50693	0.31425	0.08141	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51140	0.02189	0.37908	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65151	-0.01163	0.05309	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.82596	0.95212	0.01259	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97704	0.96197	0.71765	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98138	0.64621	0.03062	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56163	0.46712	0.87773	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91050	0.13078	0.54035	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.73894	0.81755	0.18238	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.90847	0.47839	0.19869	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57090	0.82627	0.53527	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.73791	0.12627	0.88594	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61786	0.23200	0.94970	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93648	0.22835	0.29188	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.61833	0.87676	0.28880	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86587	0.73006	0.14363	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86268	0.08729	0.79009	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.55092	0.72411	0.78421	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.98568	0.24998	0.77776	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85559	0.97948	0.29890	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61581	0.70319	0.04516	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.48527	0.74356	0.29947	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61459	-0.00840	0.77316	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.85530	0.23787	0.04407	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.21196	0.40276	0.75331	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.25843	0.64753	0.53588	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.39341	0.70909	0.51901	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.38048	0.45669	0.81932	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.30308	0.70771	0.83601	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.30736	0.53612	0.69078	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.22864	0.72318	0.56718	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.30529	0.69486	0.50613	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.22067	0.31459	0.80268	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.17362	0.44634	0.80176	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.42399	0.71414	0.43727	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.41450	0.78900	0.58936	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.41412	0.53420	0.87695	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.36752	0.38562	0.89128	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.32058	0.69984	0.94017	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.35347	0.44904	0.45071	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.35584	0.31389	0.55466	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.27745	0.35089	0.47313	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.32372	0.80316	0.81529	0.00000	Uiso	1.00
N93	N	0.32573	0.39589	0.52453	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (0,2)

```

data_8MR-0-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z

```



O62	O	0.62118	0.23297	0.84378	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94567	0.25757	0.24713	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.63073	0.87461	0.23658	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87746	0.76305	0.11769	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87318	0.12528	0.74367	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54889	0.73724	0.72516	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00261	0.27225	0.73854	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86046	0.01456	0.26112	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62681	0.73190	0.97612	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50497	0.71282	0.25090	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64217	0.97160	0.72569	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86834	0.27562	-0.00409	0.00000	Uiso	1.00
Cu74	Cu	0.31884	0.37375	0.91778	0.00000	Uiso	1.00
H75	H	0.20704	0.48068	0.99632	0.00000	Uiso	1.00
H76	H	0.28378	0.59713	0.02732	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.23575	0.57171	0.86626	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.40808	0.39471	0.72468	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.40971	0.55457	0.81853	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.34427	0.50353	0.68443	0.00000	Uiso	1.00
N81	N	0.25288	0.52031	0.95399	0.00000	Uiso	1.00
N82	N	0.37534	0.46810	0.76760	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (1,2)

```

data_8MR-1-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04725  0.34451  0.86820  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43963  0.09647  0.32035  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16264  0.88883  0.09995  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32759  0.88988  0.12487  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44302  0.12343  0.64581  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05887  0.67907  0.88728  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.05231  0.90636  0.65917  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16103  0.12060  0.87361  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04400  0.88581  0.32796  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43733  0.33291  0.08951  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54766  0.33739  0.86040  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.92980  0.11402  0.31997  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.65964  0.88212  0.08621  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82734  0.90310  0.10294  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.94139  0.13421  0.65223  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.54980  0.66419  0.87221  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94227  0.67722  0.12009  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56013  0.88986  0.64608  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82720  0.13558  0.88113  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66109  0.10353  0.85885  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55397  0.88280  0.31837  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.92978  0.34455  0.09428  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32850  0.11228  0.87166  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.43926  0.66143  0.10628  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.00274  0.33823  0.00985  0.00000  Uiso  1.00

```

O27	O	0.00381	0.03273	0.31412	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.15878	0.03781	0.02176	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.33041	0.97745	0.98501	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.49200	0.98779	0.65201	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.47242	0.65236	0.93661	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07109	0.51154	0.84102	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42516	0.16409	0.48044	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24306	0.86431	0.16448	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42043	0.48806	0.15681	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07166	0.86718	0.49461	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24122	0.16588	0.83559	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12163	0.26977	0.90273	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.43556	0.22111	0.21183	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.11261	0.89398	0.23314	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35249	0.72862	0.08717	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36797	0.08697	0.71257	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04522	0.75942	0.74137	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48644	0.27083	0.73127	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37496	-0.03063	0.26792	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.13405	0.74973	-0.01911	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	-0.01083	0.74524	0.26838	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11665	0.01787	0.74091	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.36985	0.27781	0.96458	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51355	0.32993	0.01549	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51925	0.03901	0.32491	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65670	0.03468	0.01270	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83791	0.98862	0.95973	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97610	-0.02041	0.65818	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.99114	0.69077	0.98366	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57395	0.50171	0.83217	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91852	0.16338	0.48669	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74395	0.84855	0.11266	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91804	0.51085	0.14155	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57594	0.84423	0.48218	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74407	0.15533	0.83494	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61691	0.24471	0.85929	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94053	0.25926	0.23737	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62946	0.90170	0.24290	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87146	0.76095	0.08902	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86983	0.12926	0.73707	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54312	0.74341	0.72321	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00070	0.26457	0.72480	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86039	0.00841	0.24649	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61464	0.75125	0.98304	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49744	0.76195	0.23419	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63170	0.98340	0.72744	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.85991	0.27525	-0.00999	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.26573	0.61993	0.86349	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.26202	0.43523	0.09165	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.34735	0.42622	0.71421	0.00000	Uiso	1.00
Cu77	Cu	0.30486	0.42810	0.90262	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.21736	0.63612	0.89243	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.20677	0.41690	0.08103	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.28327	0.35956	0.15211	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.40268	0.42766	0.72974	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.33481	0.51407	0.66134	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.30079	0.67746	0.94236	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.33000	0.33309	0.64958	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.27832	0.53541	0.14432	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (2,2)

```

data_8MR-2-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357

```

_cell_length_c	9.3358						
_cell_angle_alpha	94.7613						
_cell_angle_beta	94.7629						
_cell_angle_gamma	94.7613						
loop_							
_atom_site_label							
_atom_site_type_symbol							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_U_iso_or_equiv							
_atom_site_adp_type							
_atom_site_occupancy							
Si2	Si	0.03992	0.32814	0.91486	0.00000	Uiso	1.00
Si3	Si	0.43405	0.08195	0.35461	0.00000	Uiso	1.00
Si4	Si	0.15522	0.87806	0.13635	0.00000	Uiso	1.00
Si5	Si	0.31976	0.86935	0.14057	0.00000	Uiso	1.00
Si6	Si	0.44072	0.11407	0.68766	0.00000	Uiso	1.00
Si7	Si	0.04778	0.66290	0.92588	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.04273	0.88697	0.69633	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.15319	0.10525	0.90433	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.04057	0.87815	0.36682	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.42332	0.31287	0.13918	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.54097	0.32345	0.90246	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.92626	0.10404	0.37159	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.65560	0.86197	0.13948	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.82164	0.88832	0.15958	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.93098	0.11360	0.70087	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.55254	0.65683	0.92712	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.93453	0.66325	0.15648	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.55122	0.88367	0.70415	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.81967	0.11748	0.93170	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.65292	0.10018	0.92995	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.54367	0.85647	0.37823	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.92621	0.33038	0.14184	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.31703	0.10399	0.92234	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.43415	0.65093	0.16692	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.00086	0.32131	0.06421	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00168	0.02823	0.36540	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.15338	0.02514	0.05417	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.31958	0.93499	0.98488	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.47299	0.95580	0.69481	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48409	0.67154	0.01914	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.05939	0.49481	0.88280	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.41260	0.13123	0.51892	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.23727	0.85181	0.19031	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.41389	0.47391	0.20679	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.06291	0.84667	0.53242	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.23203	0.14227	0.85354	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.11512	0.25483	0.93316	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.44840	0.22810	0.27780	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.11192	0.89606	0.28028	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35114	0.71470	0.12767	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37170	0.13049	0.77838	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.03736	0.73945	0.77668	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.50290	0.24345	0.74778	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36793	0.97656	0.27060	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.11780	0.73989	0.02821	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.98634	0.74178	0.29378	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.10578	0.00148	0.77605	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.34825	0.24050	0.05710	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.48729	0.31075	0.02887	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51069	0.01224	0.36909	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.64923	0.01988	0.07803	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.82683	0.97127	0.01351	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.96590	0.95871	0.69760	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.97499	0.67350	0.00933	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56402	0.48989	0.87765	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91101	0.15156	0.53658	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.73912	0.84414	0.18988	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91370	0.49719	0.18615	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57589	0.84592	0.54446	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.73536	0.14094	0.89525	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61375	0.24793	0.94771	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93291	0.24899	0.28804	0.00000	Uiso	1.00

O64	O	0.61013	0.84916	0.27813	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86048	0.74057	0.13765	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.85740	0.10023	0.78165	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.53659	0.73410	0.77763	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.98719	0.24382	0.78125	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85961	0.99183	0.29832	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62719	0.73411	0.01324	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.47972	0.73001	0.33165	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61262	0.99383	0.79540	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.85786	0.25753	0.03338	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.38176	0.57771	0.46751	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.36380	0.42273	0.83433	0.00000	Uiso	1.00
Cu76	Cu	0.35131	0.51715	0.65159	0.00000	Uiso	1.00
H77	H	0.42136	0.65384	0.45660	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.38589	0.50940	0.37968	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.33316	0.43130	0.91452	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.36908	0.31652	0.81638	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.32884	0.74973	0.81003	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.39801	0.78696	0.71578	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.33744	0.25857	0.52578	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.26874	0.28047	0.62363	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.26861	0.34614	0.46297	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.40752	0.69372	0.85721	0.00000	Uiso	1.00
N87	N	0.37256	0.70671	0.76771	0.00000	Uiso	1.00
N88	N	0.30059	0.33104	0.55432	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (3,2)

```

data_8MR-3-2
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04566  0.32327  0.90772  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43563  0.08256  0.34987  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16012  0.86473  0.13421  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32327  0.87384  0.15617  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44157  0.10133  0.69263  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05570  0.65629  0.92071  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.04826  0.88066  0.69569  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.15816  0.09399  0.91163  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04251  0.86621  0.36542  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43428  0.30566  0.13286  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54307  0.31999  0.90083  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93258  0.09696  0.36036  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66061  0.86833  0.13228  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82737  0.88456  0.14270  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93717  0.11224  0.69144  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55501  0.65261  0.91740  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93954  0.65823  0.15661  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56133  0.88008  0.69902  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82563  0.11733  0.92020  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66039  0.09091  0.90781  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.54938  0.84859  0.35880  0.00000  Uiso  1.00

```



Si23	Si	0.93245	0.32636	0.13504	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.32520	0.08167	0.91063	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44279	0.64071	0.16269	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.00752	0.32164	0.05744	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00818	0.02051	0.35782	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.15774	0.01915	0.06375	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.31511	0.91662	0.98871	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.49414	0.97545	0.72813	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48061	0.66270	0.99505	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.06845	0.48892	0.87546	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43014	0.11857	0.52114	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.23975	0.83378	0.19751	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.40755	0.46364	0.16603	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.06986	0.84412	0.53189	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.23793	0.13803	0.86712	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12007	0.24545	0.92773	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45246	0.23606	0.28536	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.10969	0.86404	0.26704	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36608	0.73384	0.16307	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36436	0.06515	0.74971	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.03732	0.73161	0.77297	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48163	0.25819	0.76820	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.35825	0.00568	0.27369	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.13107	0.73472	0.00619	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.98282	0.73339	0.30613	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11432	0.98438	0.78306	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37144	0.21151	0.03089	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51046	0.31457	0.05552	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.49996	0.98007	0.32186	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65648	0.02317	0.06279	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83320	0.96881	0.99760	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97382	0.95950	0.69567	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.99037	0.66925	0.02322	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57017	0.48537	0.87548	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91759	0.14413	0.52559	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74480	0.83980	0.16895	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91732	0.49142	0.18007	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57256	0.85600	0.53069	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74292	0.15024	0.88697	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61192	0.22537	0.89786	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94133	0.24349	0.27980	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62419	0.87727	0.28262	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86779	0.73801	0.11926	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86334	0.10189	0.76983	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54530	0.72511	0.76400	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99370	0.24319	0.77148	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86630	0.98682	0.28262	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62370	0.73567	0.01888	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50736	0.69503	0.30421	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63555	0.96414	0.77948	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86587	0.25325	0.02455	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.21009	0.65180	0.72056	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.36822	0.70452	0.82656	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.24454	0.34576	0.69057	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.27703	0.49152	0.97945	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.38467	0.46808	0.63569	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.31593	0.51025	0.78675	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.19875	0.70754	0.80784	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.23598	0.41029	0.97365	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.31908	0.46636	0.05133	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.42394	0.40644	0.67653	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.35991	0.41031	0.54401	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.41532	0.69648	0.88762	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.34376	0.77997	0.88305	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.24040	0.26094	0.75202	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.21792	0.72257	0.65103	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.41063	0.56112	0.60654	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.19798	0.38705	0.68665	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.25928	0.58445	0.02496	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (4,2)

data\_8MR-4-2

```

_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a           18.6712
_cell_length_b           9.3357
_cell_length_c           9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04576  0.32258  0.91752  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43650  0.08388  0.36215  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.15841  0.87045  0.14209  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32607  0.87732  0.15977  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44655  0.11829  0.69676  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05194  0.65468  0.93025  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.04667  0.88132  0.70103  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.15763  0.09554  0.90955  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04512  0.87020  0.37177  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.42808  0.31197  0.14735  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54671  0.32937  0.91362  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93190  0.09776  0.37463  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66066  0.86807  0.15225  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82646  0.88379  0.16086  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93523  0.10943  0.70404  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55293  0.65971  0.93958  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93820  0.65533  0.15869  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.55462  0.88767  0.71646  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82414  0.11483  0.93429  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.65815  0.10507  0.94060  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55070  0.84734  0.38888  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93215  0.32605  0.14563  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32519  0.09642  0.93066  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.44242  0.64500  0.18603  0.00000  Uiso  1.00
O26  O  0.00731  0.32361  0.06787  0.00000  Uiso  1.00
O27  O  0.00725  0.02126  0.37227  0.00000  Uiso  1.00
O28  O  0.15195  0.01581  0.05878  0.00000  Uiso  1.00
O29  O  0.33192  0.92917  0.99936  0.00000  Uiso  1.00
O30  O  0.47716  0.95931  0.70402  0.00000  Uiso  1.00
O31  O  0.48227  0.66521  0.02562  0.00000  Uiso  1.00
O32  O  0.06780  0.48860  0.88135  0.00000  Uiso  1.00
O33  O  0.42262  0.14032  0.52815  0.00000  Uiso  1.00
O34  O  0.24080  0.84481  0.19015  0.00000  Uiso  1.00
O35  O  0.41192  0.46915  0.21666  0.00000  Uiso  1.00
O36  O  0.06550  0.83440  0.53721  0.00000  Uiso  1.00
O37  O  0.23780  0.12553  0.86571  0.00000  Uiso  1.00
O38  O  0.12061  0.24777  0.93418  0.00000  Uiso  1.00
O39  O  0.45925  0.22216  0.27839  0.00000  Uiso  1.00
O40  O  0.11792  0.88770  0.28987  0.00000  Uiso  1.00
O41  O  0.36380  0.73237  0.18616  0.00000  Uiso  1.00
O42  O  0.37561  0.12933  0.78238  0.00000  Uiso  1.00
O43  O  0.04186  0.73456  0.78310  0.00000  Uiso  1.00
O44  O  0.50886  0.24537  0.76152  0.00000  Uiso  1.00
O45  O  0.36024  0.00240  0.28891  0.00000  Uiso  1.00
O46  O  0.12007  0.73062  0.03730  0.00000  Uiso  1.00
O47  O  0.99119  0.73633  0.29293  0.00000  Uiso  1.00
O48  O  0.11064  -0.00440  0.77715  0.00000  Uiso  1.00
O49  O  0.35492  0.23546  0.06226  0.00000  Uiso  1.00
O50  O  0.49319  0.32464  0.04006  0.00000  Uiso  1.00
O51  O  0.50261  -0.01720  0.36519  0.00000  Uiso  1.00
O52  O  0.65786  0.02621  0.08976  0.00000  Uiso  1.00
O53  O  0.83140  0.96825  0.01560  0.00000  Uiso  1.00

```

O54	O	0.97027	0.95439	0.70251	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.97786	0.65580	0.00958	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56914	0.49570	0.88411	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91630	0.14686	0.53919	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74423	0.83913	0.19116	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91731	0.49091	0.19417	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58124	0.85231	0.55818	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74033	0.14291	0.90043	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61984	0.25407	0.96012	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94022	0.24154	0.28962	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62105	0.86816	0.29900	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86544	0.73599	0.13720	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86118	0.09675	0.78309	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.53966	0.73781	0.78966	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99153	0.23936	0.78574	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86560	0.98577	0.30005	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62514	0.74052	0.03200	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50221	0.69782	0.34070	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61572	0.99716	0.81009	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86487	0.25308	0.03527	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.46015	0.50655	0.55863	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.20141	0.56040	0.71751	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.31994	0.55365	0.40972	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.36571	0.42532	0.81760	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.34187	0.50628	0.62124	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.16768	0.51649	0.77973	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.17034	0.60482	0.64816	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.49873	0.52383	0.63680	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.47599	0.56525	0.48168	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.32068	0.65017	0.37483	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.35252	0.50449	0.34352	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.33358	0.43827	0.89435	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.37054	0.31899	0.80727	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.31744	0.73734	0.76983	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.38554	0.78175	0.67302	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.33657	0.24050	0.52357	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.26841	0.26224	0.62412	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.26335	0.31438	0.45716	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.39952	0.69459	0.81603	0.00000	Uiso	1.00
N93	N	0.36285	0.70171	0.72843	0.00000	Uiso	1.00
N94	N	0.29734	0.30833	0.54805	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (0,3)

```

data_8MR-0-3
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04784  0.31397  0.88640  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43992  0.06890  0.32818  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16373  0.85777  0.11246  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32742  0.86229  0.12359  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44186  0.08900  0.65702  0.00000  Uiso  1.00

```

Si7	Si	0.05762	0.64475	0.89793	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.05051	0.87292	0.67190	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.16066	0.08820	0.88443	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.04749	0.85981	0.33974	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.43225	0.30556	0.09860	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.54564	0.30822	0.87468	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.93331	0.08750	0.33720	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.66291	0.84910	0.10025	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.82938	0.87649	0.12241	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.94034	0.10111	0.66980	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.55774	0.63693	0.88621	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94283	0.64712	0.12962	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.56157	0.86515	0.66292	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.82717	0.10776	0.89754	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.66120	0.08080	0.88314	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.55304	0.85072	0.33759	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.93174	0.31864	0.11198	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.32684	0.09536	0.88035	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44399	0.63374	0.13068	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.00624	0.31808	0.03188	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00759	0.00743	0.32850	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.16251	0.00606	0.03278	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.32370	0.94605	0.98090	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48865	0.94858	0.66064	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48545	0.64413	0.96962	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07362	0.47839	0.85054	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42397	0.12589	0.49053	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24441	0.82214	0.16749	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.41447	0.46138	0.16755	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07017	0.83528	0.50731	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.23806	0.13804	0.83549	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12175	0.23742	0.91796	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.43855	0.19978	0.22766	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.11942	0.87332	0.25432	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35874	0.70521	0.08513	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36763	0.04917	0.72562	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04561	0.72379	0.75063	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48932	0.23020	0.74333	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37516	0.94409	0.26414	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12826	0.72044	-0.00019	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	-0.00501	0.71992	0.26931	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11380	-0.01472	0.75529	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.36706	0.25032	-0.02241	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.50991	0.31362	0.02770	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51883	0.00668	0.33196	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65948	0.00499	0.03386	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83667	0.96152	0.97803	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97405	-0.05490	0.67376	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98610	0.64764	0.98454	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57200	0.47071	0.83849	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.92187	0.13527	0.50415	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74707	0.82393	0.14299	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91759	0.48352	0.16102	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58377	0.82792	0.50161	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74412	0.13269	0.85675	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61742	0.22193	0.89132	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94222	0.23310	0.25488	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62340	0.85422	0.24643	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87291	0.73411	0.10321	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86705	0.09478	0.74958	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54550	0.71653	0.73812	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.00134	0.23000	0.74863	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86466	-0.01957	0.26453	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62886	0.71689	0.98399	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49252	0.72433	0.27813	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62931	0.96467	0.75045	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86439	0.24672	0.00249	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.25922	0.47413	0.07742	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.35824	0.68834	0.78795	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.24249	0.43743	0.76546	0.00000	Uiso	1.00
Cu77	Cu	0.30243	0.57273	0.91888	0.00000	Uiso	1.00
H78	H	0.22338	0.38536	0.04741	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.30511	0.44509	0.13433	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.35306	0.66160	-0.32124	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.34918	0.79577	0.80647	0.00000	Uiso	1.00

H82	H	0.25787	0.44524	0.66339	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.24494	0.33030	0.78898	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.41162	0.68090	0.82666	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.18912	0.45794	0.76460	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.23564	0.54867	0.14064	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (1,3)

```

data_8MR-1-3
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04048  0.31841  0.89967  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43298  0.07619  0.36138  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.15401  0.86723  0.13699  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32010  0.86521  0.16458  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.43678  0.09310  0.68486  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05152  0.65513  0.92431  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.04602  0.88036  0.69548  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.15446  0.09532  0.90958  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.03619  0.85654  0.36618  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43205  0.30934  0.12818  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54317  0.31235  0.90417  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.92324  0.08678  0.35539  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.65336  0.85854  0.12288  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82065  0.87421  0.13761  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93529  0.10985  0.68582  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.54188  0.64243  0.91157  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93522  0.64945  0.15747  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.55393  0.86555  0.68198  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82131  0.10601  0.91694  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.65566  0.08442  0.89993  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.54783  0.85705  0.35895  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.92376  0.31428  0.12845  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32337  0.09306  0.91334  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.43160  0.63850  0.14988  0.00000  Uiso  1.00
O26  O  -0.00532  0.30355  0.03880  0.00000  Uiso  1.00
O27  O  -0.00304  0.00463  0.35423  0.00000  Uiso  1.00
O28  O  0.14800  0.01579  0.05939  0.00000  Uiso  1.00
O29  O  0.32239  0.94360  0.01485  0.00000  Uiso  1.00
O30  O  0.48110  0.95004  0.67524  0.00000  Uiso  1.00
O31  O  0.46520  0.64141  0.97869  0.00000  Uiso  1.00
O32  O  0.06303  0.48752  0.87905  0.00000  Uiso  1.00
O33  O  0.41826  0.14291  0.52299  0.00000  Uiso  1.00
O34  O  0.23497  0.84666  0.20061  0.00000  Uiso  1.00
O35  O  0.41470  0.46397  0.19425  0.00000  Uiso  1.00
O36  O  0.06541  0.83767  0.53163  0.00000  Uiso  1.00
O37  O  0.23530  0.13486  0.87489  0.00000  Uiso  1.00
O38  O  0.11575  0.24623  0.92900  0.00000  Uiso  1.00
O39  O  0.43398  0.20198  0.25530  0.00000  Uiso  1.00
O40  O  0.10368  0.86353  0.26873  0.00000  Uiso  1.00
O41  O  0.34645  0.70658  0.13828  0.00000  Uiso  1.00
O42  O  0.36279  0.04931  0.75424  0.00000  Uiso  1.00

```

O43	O	0.03669	0.73378	0.77789	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48537	0.22867	0.77721	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36588	0.95600	0.30395	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12745	0.72887	0.01411	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.98002	0.71730	0.30809	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11079	-0.01016	0.77739	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.36959	0.25054	-0.00110	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51075	0.31026	0.06000	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51100	0.01082	0.36949	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65178	0.01264	0.05206	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83069	0.95647	-0.00791	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97047	0.95597	0.69205	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98527	0.66942	0.02387	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56116	0.47769	0.86572	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.90935	0.13600	0.52079	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.73706	0.82252	0.15056	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91283	0.48135	0.17382	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57534	0.82064	0.52188	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.73835	0.12446	0.86679	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61722	0.23321	0.90718	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93597	0.23157	0.27289	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62129	0.87789	0.27739	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86332	0.72999	0.12536	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86518	0.10435	0.77501	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.53435	0.71890	0.75926	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99438	0.24244	0.75355	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85441	0.98148	0.27887	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.60903	0.72834	0.01636	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49146	0.73269	0.28111	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61972	0.96789	0.77043	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.85196	0.24357	0.03030	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.24351	0.73710	0.84095	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.26776	0.47132	0.96242	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.36217	0.71551	0.68646	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.36724	0.41738	0.74419	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.31126	0.58136	0.81056	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.20206	0.71464	0.89727	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.29643	0.38420	-0.01499	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.27603	0.54487	0.05280	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.41715	0.71494	0.70823	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.35133	0.82196	0.70603	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.37647	0.35653	0.83100	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.34146	0.34844	0.66067	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.27353	0.81929	0.90186	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.41698	0.45016	0.71306	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.35034	0.68824	0.57775	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.21427	0.43387	0.94250	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (2,3)

```

data_8MR-2-3
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting     triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type

```

\_atom\_site\_occupancy

Si2	Si	0.04933	0.32956	0.92147	0.00000	Uiso	1.00
Si3	Si	0.43797	0.07891	0.36846	0.00000	Uiso	1.00
Si4	Si	0.16134	0.87835	0.14560	0.00000	Uiso	1.00
Si5	Si	0.32376	0.86425	0.16589	0.00000	Uiso	1.00
Si6	Si	0.44459	0.09479	0.69722	0.00000	Uiso	1.00
Si7	Si	0.05457	0.66509	0.93246	0.00000	Uiso	1.00
Si8	Si	0.05034	0.88995	0.70481	0.00000	Uiso	1.00
Si9	Si	0.16302	0.10539	0.91546	0.00000	Uiso	1.00
Si10	Si	0.04432	0.87650	0.37675	0.00000	Uiso	1.00
Si11	Si	0.43708	0.30773	0.13657	0.00000	Uiso	1.00
Si12	Si	0.54526	0.31402	0.90782	0.00000	Uiso	1.00
Si13	Si	0.93051	0.10306	0.37476	0.00000	Uiso	1.00
Si14	Si	0.65843	0.86512	0.13435	0.00000	Uiso	1.00
Si15	Si	0.82958	0.89258	0.15847	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.93920	0.11852	0.70341	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.55486	0.64770	0.92550	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94114	0.66474	0.16915	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.56864	0.87369	0.69429	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.83074	0.12179	0.93449	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.66124	0.08661	0.90534	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.55344	0.86047	0.36799	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.93497	0.33200	0.14400	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.32815	0.08874	0.91933	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.43945	0.64346	0.15489	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.01190	0.32520	0.07265	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00575	0.02582	0.37119	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.16255	0.02821	0.06780	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.31863	0.93438	0.01211	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.50024	0.97047	0.70354	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.47638	0.65755	0.98679	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.06828	0.49761	0.88968	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42016	0.12969	0.53250	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.23989	0.84246	0.21153	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42130	0.46738	0.18986	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07301	0.85192	0.54179	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.24198	0.13910	0.86536	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12591	0.25862	0.93915	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.44201	0.21736	0.27797	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.11173	0.88731	0.27918	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35323	0.70796	0.14455	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37302	0.03748	0.76907	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04133	0.74074	0.78331	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48243	0.24790	0.78018	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.37106	0.96464	0.29680	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12904	0.74297	0.02400	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.98883	0.73816	0.31435	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11312	0.00004	0.79200	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37211	0.24006	0.01744	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51471	0.30125	0.06448	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51553	0.01273	0.37687	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.64450	0.00778	0.04951	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84730	0.98137	0.02032	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97425	0.96362	0.69940	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98697	0.67949	0.02843	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56871	0.48029	0.88131	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91955	0.15900	0.54000	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74471	0.85158	0.16134	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.92181	0.49726	0.19311	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57947	0.82152	0.52978	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74620	0.14137	0.90965	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61620	0.22623	0.89701	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93824	0.24381	0.28550	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62777	0.88702	0.28991	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86799	0.74284	0.14303	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86498	0.10398	0.78048	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.55545	0.73186	0.78011	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99654	0.24559	0.78816	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86273	0.99020	0.30667	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62133	0.71888	0.04154	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49833	0.73528	0.28804	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.64153	0.97237	0.76378	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86923	0.26749	0.02672	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.23606	0.73461	0.82661	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.38306	0.72313	0.77308	0.00000	Uiso	1.00

N76	N	0.27793	0.47976	0.95411	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.27188	0.61851	0.55473	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.33521	0.37597	0.69768	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.28858	0.55682	0.76111	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.19695	0.71950	0.89001	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.30871	0.39479	0.97438	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.29496	0.56259	0.03447	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.32115	0.66443	0.53208	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.23709	0.69814	0.55580	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.37992	0.36670	0.76785	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.30011	0.28638	0.70550	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.41986	0.70817	0.85311	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.37979	0.82813	0.77582	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.27256	0.80485	0.88752	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.35285	0.36809	0.59627	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.25356	0.54243	0.47154	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.22517	0.44280	0.96251	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (3,3)

```

data_8MR-3-3
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04789  0.34013  0.92745  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43696  0.09244  0.36964  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.15956  0.88950  0.15298  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32164  0.87592  0.16825  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44302  0.10121  0.69934  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05195  0.67547  0.93951  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.04792  0.89920  0.71100  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16054  0.11468  0.92176  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04284  0.88631  0.38338  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43688  0.31611  0.13904  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54472  0.32178  0.91084  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.92825  0.11292  0.38064  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.65644  0.87534  0.13479  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82839  0.90391  0.16398  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93796  0.12945  0.70883  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55302  0.65980  0.92703  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93927  0.67420  0.17630  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56721  0.88330  0.69476  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.83027  0.13095  0.94088  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.65966  0.09731  0.90741  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55238  0.87075  0.36813  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93307  0.34193  0.14994  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32581  0.09600  0.92200  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.43873  0.65720  0.15345  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.00976  0.33524  0.07772  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.00275  0.03355  0.37706  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.16159  0.03914  0.07446  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.31461  0.93975  0.01113  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.49615  0.97246  0.70522  0.00000  Uiso  1.00

```



O31	O	0.47452	0.67927	0.98515	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.06690	0.50850	0.89698	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.41783	0.13496	0.53462	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.23840	0.85299	0.21674	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.42136	0.47858	0.17845	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07109	0.86124	0.54852	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.23915	0.14539	0.86675	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12446	0.26878	0.94582	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.44318	0.23714	0.28805	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.11067	0.90028	0.28729	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.35281	0.72134	0.15298	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.37020	0.04906	0.77007	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.03863	0.75041	0.78995	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48414	0.25110	0.78133	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36868	0.98509	0.29256	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12572	0.75457	0.03244	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.98865	0.74641	0.31978	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11022	0.00958	0.79935	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37083	0.24227	0.02537	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51376	0.30212	0.06603	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51330	0.02194	0.37522	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.63984	0.01560	0.04814	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.84936	0.99176	0.02683	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97208	0.97364	0.70435	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98350	0.68832	0.03333	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56325	0.49004	0.88600	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91797	0.17036	0.54577	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74301	0.86521	0.15946	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91982	0.50683	0.20032	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57849	0.83323	0.53017	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74535	0.14515	0.91608	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61843	0.24237	0.90179	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93675	0.25306	0.29083	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62696	0.89901	0.29127	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86612	0.75315	0.15343	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86392	0.11572	0.78634	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.55759	0.73998	0.77969	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99584	0.25590	0.79320	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85950	0.00191	0.31332	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61993	0.72708	0.04437	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.49881	0.74307	0.28823	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63848	0.98789	0.76281	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86698	0.27825	0.03294	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.23220	0.73808	0.83539	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.37866	0.73459	0.76671	0.00000	Uiso	1.00
O76	O	0.25511	0.20146	0.57344	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.27508	0.48643	0.97501	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.25056	0.56995	0.56777	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.35577	0.41956	0.72716	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.28909	0.56658	0.78368	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.19386	0.72298	0.90041	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.30555	0.40118	-0.00612	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.29194	0.56758	0.05659	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.29028	0.61338	0.51045	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.20815	0.63268	0.55866	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.38073	0.37663	0.81389	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.32603	0.33555	0.66153	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.41626	0.72507	0.84702	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.37371	0.83875	0.76631	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.28820	0.13414	0.53712	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.26775	0.81301	0.89342	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.39580	0.46428	0.67131	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.23414	0.46775	0.52096	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.24278	0.16694	0.66638	0.00000	Uiso	1.00
H95	H	0.22213	0.44997	0.98129	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (0,4)

```

data_8MR-0-4
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number    1

```

```

_symmetry_cell_setting      triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a             18.6712
_cell_length_b             9.3357
_cell_length_c             9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04588  0.30879  0.89987  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43927  0.05563  0.33054  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16168  0.85543  0.13188  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32128  0.84100  0.12439  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.43948  0.06779  0.66240  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05474  0.64287  0.91929  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.05178  0.86889  0.69107  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16166  0.08345  0.90224  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04433  0.85030  0.35897  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43807  0.27890  0.10926  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54343  0.28793  0.87400  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.92920  0.07722  0.35359  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.65739  0.83278  0.10255  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82714  0.86694  0.13777  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93942  0.09943  0.68532  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55510  0.62005  0.89260  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94007  0.63853  0.15074  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56290  0.84593  0.66707  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82725  0.09526  0.91460  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.65846  0.05863  0.88427  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.54756  0.82147  0.34050  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93002  0.30707  0.12621  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32393  0.05789  0.88844  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.43643  0.61405  0.13276  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.00401  0.30332  0.04507  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.00316 -0.00380  0.34919  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.15955  0.00438  0.05267  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.30544  0.89615  0.96503  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.49303  0.93877  0.67250  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.48328  0.63049  0.97619  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.07095  0.47655  0.87461  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.41839  0.09469  0.49481  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.24175  0.82232  0.19144  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.41020  0.43439  0.14269  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.06983  0.82680  0.52597  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.24069  0.13265  0.85967  0.00000  Uiso  1.00
O38  O   0.11876  0.22847  0.92257  0.00000  Uiso  1.00
O39  O   0.45339  0.20596  0.25995  0.00000  Uiso  1.00
O40  O   0.11479  0.86596  0.27041  0.00000  Uiso  1.00
O41  O   0.35332  0.68697  0.10738  0.00000  Uiso  1.00
O42  O   0.36527  0.01791  0.72971  0.00000  Uiso  1.00
O43  O   0.04303  0.71939  0.76966  0.00000  Uiso  1.00
O44  O   0.48145  0.21635  0.74703  0.00000  Uiso  1.00
O45  O   0.37283  0.95542  0.23816  0.00000  Uiso  1.00
O46  O   0.12691  0.71941  0.01544  0.00000  Uiso  1.00
O47  O  -0.00879  0.70950  0.29265  0.00000  Uiso  1.00
O48  O   0.11942 -0.02797  0.77188  0.00000  Uiso  1.00
O49  O   0.37870  0.18436 -0.00193  0.00000  Uiso  1.00
O50  O   0.51488  0.28885  0.03303  0.00000  Uiso  1.00
O51  O   0.51384 -0.02256  0.33713  0.00000  Uiso  1.00
O52  O   0.64627 -0.01344  0.03474  0.00000  Uiso  1.00
O53  O   0.84145  0.95031  0.99463  0.00000  Uiso  1.00
O54  O   0.97771 -0.05136  0.69382  0.00000  Uiso  1.00
O55  O   0.98377  0.64936  0.00677  0.00000  Uiso  1.00
O56  O   0.56649  0.45282  0.83974  0.00000  Uiso  1.00
O57  O   0.91739  0.12783  0.51947  0.00000  Uiso  1.00

```

O58	O	0.74281	0.82218	0.14603	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91713	0.47244	0.17581	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58042	0.80225	0.50441	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74297	0.11099	0.87678	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61419	0.19851	0.87079	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93941	0.22061	0.26857	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.61728	0.82719	0.24725	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86806	0.72053	0.12755	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86648	0.08630	0.76614	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54187	0.69935	0.74345	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	-0.00515	0.23513	0.75902	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85996	-0.02951	0.28205	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62826	0.69675	-0.01453	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.48761	0.69251	0.28584	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63433	0.93717	0.75033	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86126	0.23763	0.01829	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.25023	0.47202	-0.06442	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.37114	0.69955	0.68043	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.37725	0.43071	0.79921	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.22316	0.69984	0.73948	0.00000	Uiso	1.00
Cu78	Cu	0.30317	0.57249	0.78572	0.00000	Uiso	1.00
H79	H	0.24658	0.36094	-0.08227	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.28331	0.50463	0.02907	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.42413	0.69291	0.71838	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.36258	0.80800	0.69771	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.36513	0.34411	-0.14228	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.39401	0.39024	0.70330	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.22666	0.74861	0.64551	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.17147	0.65279	0.73758	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.42146	0.49001	0.85711	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.36814	0.67392	0.57084	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.23237	0.78029	0.82407	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.19954	0.50204	-0.04994	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (1,4)

```

data_8MR-1-4
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting      triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a      18.6712
_cell_length_b      9.3357
_cell_length_c      9.3358
_cell_angle_alpha   94.7613
_cell_angle_beta    94.7629
_cell_angle_gamma   94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04626  0.31998  0.89605  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43706  0.08050  0.33952  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16088  0.86387  0.12946  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32396  0.86776  0.14023  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44080  0.08891  0.67031  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05435  0.65216  0.91558  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.05162  0.87953  0.68817  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16010  0.09463  0.90228  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04418  0.86024  0.35918  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43805  0.30313  0.11622  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54795  0.31218  0.88652  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93119  0.09073  0.35179  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66060  0.85651  0.11136  0.00000  Uiso  1.00

```

Si15	Si	0.82728	0.87859	0.13565	0.00000	Uiso	1.00
Si16	Si	0.94105	0.11021	0.68120	0.00000	Uiso	1.00
Si17	Si	0.55548	0.64246	0.89769	0.00000	Uiso	1.00
Si18	Si	0.94001	0.65005	0.15048	0.00000	Uiso	1.00
Si19	Si	0.55999	0.86825	0.67240	0.00000	Uiso	1.00
Si20	Si	0.82718	0.10839	0.91221	0.00000	Uiso	1.00
Si21	Si	0.66141	0.08583	0.89138	0.00000	Uiso	1.00
Si22	Si	0.55040	0.84131	0.34566	0.00000	Uiso	1.00
Si23	Si	0.92964	0.31908	0.12541	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.32518	0.08101	0.89459	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44183	0.63533	0.14139	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.00121	0.31574	0.03686	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00511	0.00900	0.35137	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.15843	0.01279	0.05086	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.31340	0.91985	0.97688	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48479	0.94500	0.67044	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.48221	0.64875	0.97725	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07003	0.48685	0.86747	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.42394	0.13099	0.50582	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24109	0.83147	0.18708	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.40850	0.45771	0.15188	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07135	0.83630	0.52467	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.23949	0.14388	0.86126	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.11957	0.24240	0.92757	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45557	0.22648	0.26366	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.11304	0.87160	0.26561	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36374	0.72403	0.13708	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36464	0.05208	0.73398	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04127	0.73301	0.77008	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.49067	0.22541	0.76007	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36279	0.99520	0.25843	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12806	0.72667	0.01092	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.98908	0.72162	0.29469	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11657	0.98852	0.77061	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37797	0.21095	0.00441	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51464	0.31929	0.04121	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.50443	0.98240	0.33477	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65806	0.01125	0.04221	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83603	0.95970	0.98916	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97644	0.95637	0.68453	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98576	0.65877	0.00931	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56873	0.47576	0.84569	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91663	0.14039	0.51664	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74436	0.82994	0.15510	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91639	0.48416	0.17534	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.58278	0.83317	0.51185	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74454	0.12866	0.86178	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.62189	0.23289	0.89858	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94357	0.23480	0.26827	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62086	0.86787	0.25688	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86898	0.73338	0.12173	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.87073	0.10281	0.76958	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54446	0.71912	0.74701	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99966	0.24202	0.75176	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86281	0.98504	0.27563	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62605	0.72313	-0.00390	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50212	0.69595	0.28821	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62560	0.97188	0.76021	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.85931	0.24617	0.02426	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.23429	0.71906	0.81085	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.26990	0.47036	0.97155	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.35990	0.70063	0.67314	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.38560	0.43979	0.79295	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.22517	0.40195	0.64054	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.30201	0.56014	0.79027	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.19501	0.69877	0.87215	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.24887	0.36509	0.94546	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.31413	0.46918	0.04643	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.41363	0.71304	0.71102	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.34327	0.80329	0.68048	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.37803	0.34829	0.84658	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.40360	0.41010	0.69502	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.22638	0.30377	0.68291	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.23601	0.38592	0.53494	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.26575	0.80092	0.87119	0.00000	Uiso	1.00

H90	H	0.42628	0.50629	0.85413	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.35780	0.66716	0.56525	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.17318	0.42960	0.64003	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.23229	0.52590	0.02088	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (2,4)

```

data_8MR-2-4
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04232  0.30042  0.90007  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43163  0.05634  0.36269  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.15717  0.84698  0.13274  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32231  0.85047  0.16230  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.43828  0.07722  0.68998  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05317  0.63310  0.91997  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.04816  0.85924  0.69030  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.15668  0.07432  0.90218  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.03970  0.83934  0.36056  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.42923  0.29636  0.13301  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54378  0.29402  0.91224  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.92523  0.06987  0.35598  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.65627  0.83734  0.13019  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82142  0.85559  0.14206  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93521  0.08785  0.68626  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.54680  0.62118  0.91650  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93693  0.62849  0.15068  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.55374  0.84762  0.68819  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82160  0.08456  0.91547  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.65717  0.06519  0.90616  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.54689  0.84217  0.36256  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.92699  0.29768  0.12828  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32473  0.08765  0.91916  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.43262  0.62157  0.15104  0.00000  Uiso  1.00
O26  O   0.00081  0.29781  0.04602  0.00000  Uiso  1.00
O27  O   0.99793  0.98473  0.35452  0.00000  Uiso  1.00
O28  O   0.15422  0.99435  0.05126  0.00000  Uiso  1.00
O29  O   0.32732  0.95044  0.03134  0.00000  Uiso  1.00
O30  O   0.48035  0.93126  0.68273  0.00000  Uiso  1.00
O31  O   0.47086  0.61424  0.98552  0.00000  Uiso  1.00
O32  O   0.06734  0.46660  0.86898  0.00000  Uiso  1.00
O33  O   0.41846  0.12545  0.52621  0.00000  Uiso  1.00
O34  O   0.23728  0.82210  0.19861  0.00000  Uiso  1.00
O35  O   0.41563  0.45063  0.21068  0.00000  Uiso  1.00
O36  O   0.06701  0.81376  0.52619  0.00000  Uiso  1.00
O37  O   0.23623  0.12070  0.86101  0.00000  Uiso  1.00
O38  O   0.11585  0.22203  0.92352  0.00000  Uiso  1.00
O39  O   0.42752  0.18144  0.25513  0.00000  Uiso  1.00
O40  O   0.10881  0.85769  0.26897  0.00000  Uiso  1.00
O41  O   0.34938  0.69403  0.12068  0.00000  Uiso  1.00
O42  O   0.36328  0.04058  0.75829  0.00000  Uiso  1.00
O43  O   0.03998  0.71293  0.77307  0.00000  Uiso  1.00

```

O44	O	0.48735	0.21307	0.78057	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.36689	0.92812	0.31313	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12474	0.70832	0.01854	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.98723	0.69728	0.29475	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11406	0.96800	0.76919	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.36766	0.25010	0.00007	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.50843	0.29593	0.06569	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.51148	-0.00193	0.37035	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65810	0.99006	0.05691	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.82665	0.93619	-0.00557	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97324	0.93660	0.68849	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98224	0.63680	0.00889	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56690	0.45676	0.87167	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91185	0.11988	0.52157	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.73941	0.79973	0.16512	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91174	0.46269	0.17444	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57367	0.80596	0.52600	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.73906	0.11208	0.86972	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61629	0.21025	0.92239	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.93859	0.21409	0.27256	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62045	0.85917	0.28061	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86656	0.71512	0.12644	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86343	0.07150	0.77041	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.53865	0.69943	0.76527	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.99102	0.22238	0.76136	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.85598	0.96602	0.28012	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61361	0.70736	0.02172	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.48896	0.71935	0.28667	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61973	0.95158	0.77548	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.85881	0.22145	0.02315	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.31560	0.75234	0.75572	0.00000	Uiso	1.00
O75	O	0.26153	0.23432	0.59001	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.28187	0.45675	0.86509	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.32068	0.56134	0.45150	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.40397	0.46246	0.68557	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.19291	0.54082	0.61970	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.29834	0.49401	0.65345	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.33266	0.75544	0.85803	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.31671	0.38750	0.90949	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.28878	0.55004	0.93401	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.35013	0.66015	0.47111	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.27675	0.57861	0.38362	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.41695	0.43771	0.78904	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.41898	0.38012	0.61758	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.15926	0.50078	0.69145	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.16912	0.50628	0.51850	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.33272	0.85019	0.73218	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.43664	0.55416	0.67354	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.35133	0.49716	0.38976	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.19411	0.65141	0.63315	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.23114	0.40864	0.87394	0.00000	Uiso	1.00
H95	H	0.30095	0.18119	0.55698	0.00000	Uiso	1.00
H96	H	0.24908	0.18861	0.67750	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (0,5)

```

data_8MR-0-5
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha        94.7613
_cell_angle_beta         94.7629
_cell_angle_gamma        94.7613
loop_
_atom_site_label

```

```

_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2 Si 0.04740 0.31508 0.94491 0.00000 Uiso 1.00
Si3 Si 0.43427 0.07201 0.38285 0.00000 Uiso 1.00
Si4 Si 0.16043 0.86165 0.17094 0.00000 Uiso 1.00
Si5 Si 0.32295 0.86050 0.18520 0.00000 Uiso 1.00
Si6 Si 0.44068 0.09265 0.71605 0.00000 Uiso 1.00
Si7 Si 0.05375 0.64792 0.95592 0.00000 Uiso 1.00
Si8 Si 0.05024 0.87481 0.73028 0.00000 Uiso 1.00
Si9 Si 0.16256 0.08929 0.94056 0.00000 Uiso 1.00
Si10 Si 0.04401 0.86187 0.39781 0.00000 Uiso 1.00
Si11 Si 0.43711 0.29554 0.16101 0.00000 Uiso 1.00
Si12 Si 0.54232 0.31434 0.92536 0.00000 Uiso 1.00
Si13 Si 0.92829 0.08852 0.39583 0.00000 Uiso 1.00
Si14 Si 0.65664 0.85875 0.15495 0.00000 Uiso 1.00
Si15 Si 0.82470 0.87859 0.17970 0.00000 Uiso 1.00
Si16 Si 0.93840 0.10443 0.72827 0.00000 Uiso 1.00
Si17 Si 0.54880 0.64115 0.94175 0.00000 Uiso 1.00
Si18 Si 0.93950 0.65010 0.18675 0.00000 Uiso 1.00
Si19 Si 0.56545 0.87038 0.71672 0.00000 Uiso 1.00
Si20 Si 0.82630 0.11106 0.95492 0.00000 Uiso 1.00
Si21 Si 0.66019 0.08438 0.92863 0.00000 Uiso 1.00
Si22 Si 0.55089 0.83441 0.38578 0.00000 Uiso 1.00
Si23 Si 0.93239 0.31951 0.16939 0.00000 Uiso 1.00
Al24 Al 0.32656 0.06959 0.93979 0.00000 Uiso 1.00
Al25 Al 0.44037 0.62318 0.18096 0.00000 Uiso 1.00
O26 O 0.00830 0.31414 0.09476 0.00000 Uiso 1.00
O27 O 0.00214 0.00692 0.38860 0.00000 Uiso 1.00
O28 O 0.16291 0.01066 0.09223 0.00000 Uiso 1.00
O29 O 0.31600 0.90663 0.02163 0.00000 Uiso 1.00
O30 O 0.49768 0.96968 0.72156 0.00000 Uiso 1.00
O31 O 0.47120 0.63600 0.00788 0.00000 Uiso 1.00
O32 O 0.06902 0.48154 0.91290 0.00000 Uiso 1.00
O33 O 0.42020 0.12520 0.54874 0.00000 Uiso 1.00
O34 O 0.23986 0.82182 0.23351 0.00000 Uiso 1.00
O35 O 0.40863 0.44872 0.21227 0.00000 Uiso 1.00
O36 O 0.06943 0.83647 0.56451 0.00000 Uiso 1.00
O37 O 0.24155 0.12875 0.89358 0.00000 Uiso 1.00
O38 O 0.12085 0.23553 0.96483 0.00000 Uiso 1.00
O39 O 0.45783 0.21452 0.30615 0.00000 Uiso 1.00
O40 O 0.11589 0.88071 0.31287 0.00000 Uiso 1.00
O41 O 0.36475 0.71916 0.20276 0.00000 Uiso 1.00
O42 O 0.36709 0.03348 0.77864 0.00000 Uiso 1.00
O43 O 0.04232 0.72471 0.80657 0.00000 Uiso 1.00
O44 O 0.47802 0.24513 0.80121 0.00000 Uiso 1.00
O45 O 0.35798 0.99170 0.30560 0.00000 Uiso 1.00
O46 O 0.12321 0.72739 0.05826 0.00000 Uiso 1.00
O47 O 0.99231 0.72132 0.32667 0.00000 Uiso 1.00
O48 O 0.11667 0.98005 0.81255 0.00000 Uiso 1.00
O49 O 0.37804 0.19954 0.05233 0.00000 Uiso 1.00
O50 O 0.51322 0.31964 0.08421 0.00000 Uiso 1.00
O51 O 0.49740 0.96421 0.38315 0.00000 Uiso 1.00
O52 O 0.65221 0.00923 0.07820 0.00000 Uiso 1.00
O53 O 0.83385 0.96478 0.03652 0.00000 Uiso 1.00
O54 O 0.97518 0.95161 0.73149 0.00000 Uiso 1.00
O55 O 0.98133 0.65595 0.04048 0.00000 Uiso 1.00
O56 O 0.56834 0.47774 0.89027 0.00000 Uiso 1.00
O57 O 0.91794 0.13776 0.56284 0.00000 Uiso 1.00
O58 O 0.74075 0.82802 0.19032 0.00000 Uiso 1.00
O59 O 0.91726 0.48455 0.21631 0.00000 Uiso 1.00
O60 O 0.57909 0.81840 0.55323 0.00000 Uiso 1.00
O61 O 0.74358 0.14421 0.91876 0.00000 Uiso 1.00
O62 O 0.61071 0.21776 0.91961 0.00000 Uiso 1.00
O63 O 0.93828 0.23339 0.31273 0.00000 Uiso 1.00
O64 O 0.62239 0.88316 0.30712 0.00000 Uiso 1.00
O65 O 0.86803 0.73505 0.16597 0.00000 Uiso 1.00
O66 O 0.86417 0.09073 0.80536 0.00000 Uiso 1.00
O67 O 0.54354 0.72707 0.79618 0.00000 Uiso 1.00
O68 O 0.99414 0.23553 0.80937 0.00000 Uiso 1.00
O69 O 0.85869 0.98265 0.32324 0.00000 Uiso 1.00

```

O70	O	0.61508	0.72237	0.05273	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50992	0.68637	0.31214	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63801	0.96213	0.79386	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86613	0.24955	0.05586	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.26116	0.78098	0.59335	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.41216	0.68908	0.55867	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.33242	0.37866	0.65971	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.28260	0.51867	0.39989	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.32816	0.63881	0.83617	0.00000	Uiso	1.00
Cu79	Cu	0.31094	0.58809	0.61638	0.00000	Uiso	1.00
H80	H	0.21090	0.78333	0.63005	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.25529	0.80507	0.48761	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.45623	0.63065	0.55572	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.42754	0.77786	0.62998	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.29196	0.32101	0.70469	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.34503	0.31462	0.57199	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.24052	0.43959	0.38246	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.32596	0.48023	0.35049	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.29386	0.86534	0.65014	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.37735	0.38317	0.73236	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.40522	0.72550	0.45803	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.26856	0.60256	0.34158	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.38149	0.63055	0.87401	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.29767	0.56811	0.89019	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.31779	0.74106	0.87718	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (1,5)

```

data_8MR-1-5
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2  Si  0.04789  0.31999  0.91743  0.00000  Uiso  1.00
Si3  Si  0.43710  0.07407  0.35510  0.00000  Uiso  1.00
Si4  Si  0.16247  0.86420  0.14871  0.00000  Uiso  1.00
Si5  Si  0.32546  0.86840  0.15782  0.00000  Uiso  1.00
Si6  Si  0.44356  0.08728  0.69731  0.00000  Uiso  1.00
Si7  Si  0.05502  0.65078  0.93373  0.00000  Uiso  1.00
Si8  Si  0.05123  0.87907  0.70719  0.00000  Uiso  1.00
Si9  Si  0.16152  0.09455  0.92098  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04720  0.86106  0.37598  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43711  0.30209  0.13962  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54758  0.30868  0.90936  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93143  0.09093  0.37116  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66185  0.85422  0.13754  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82837  0.87981  0.15687  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.94125  0.10848  0.70248  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55649  0.63796  0.91927  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.94277  0.64940  0.16716  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.56107  0.86740  0.69971  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82819  0.10855  0.93305  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66255  0.07983  0.91140  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55128  0.84049  0.35950  0.00000  Uiso  1.00

```



Si23	Si	0.93199	0.32018	0.14652	0.00000	Uiso	1.00
Al24	Al	0.32558	0.08274	0.91383	0.00000	Uiso	1.00
Al25	Al	0.44431	0.63254	0.15844	0.00000	Uiso	1.00
O26	O	0.00445	0.31935	0.06047	0.00000	Uiso	1.00
O27	O	0.00346	0.00352	0.36572	0.00000	Uiso	1.00
O28	O	0.16214	0.01315	0.06989	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.31641	0.91842	0.99331	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.48941	0.94990	0.72676	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.47889	0.64223	0.98625	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.07191	0.48590	0.88538	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.43261	0.11015	0.52656	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.24236	0.82282	0.19989	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.40932	0.45811	0.17796	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.07191	0.83832	0.54355	0.00000	Uiso	1.00
O37	O	0.23960	0.13970	0.87343	0.00000	Uiso	1.00
O38	O	0.12123	0.24227	0.94822	0.00000	Uiso	1.00
O39	O	0.45335	0.22651	0.28861	0.00000	Uiso	1.00
O40	O	0.11897	0.88211	0.29152	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.36935	0.73009	0.16048	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.36481	0.06207	0.75258	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.04457	0.72903	0.78483	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.48931	0.23411	0.77861	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.35929	-0.00207	0.27932	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.12467	0.72975	0.03523	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	-0.00221	0.71709	0.30519	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.11555	-0.01202	0.79166	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37559	0.21323	0.02869	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51349	0.31426	0.06357	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.50128	-0.02806	0.32528	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.65926	0.00539	0.06222	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.83723	0.95947	0.00940	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.97548	-0.04708	0.70577	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98291	0.65345	0.01820	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.57307	0.47219	0.87503	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91947	0.14034	0.53743	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74597	0.82383	0.17242	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91747	0.48500	0.19536	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57211	0.84148	0.53151	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74556	0.13286	0.88811	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.61876	0.22109	0.91775	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94560	0.23600	0.28972	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62757	0.87448	0.28968	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.87346	0.73908	0.14918	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86987	0.10150	0.78755	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.55199	0.71358	0.76808	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.00012	0.23868	0.77591	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86084	-0.00921	0.29628	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.62206	0.71958	0.03063	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.51147	0.68847	0.29436	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.63266	0.96393	0.77684	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86292	0.24557	0.04336	0.00000	Uiso	1.00
O74	O	0.36882	0.71378	0.81527	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.26013	0.49628	0.00708	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.22209	0.70625	0.75847	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.31479	0.53198	0.44283	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.36741	0.41202	0.78362	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.22373	0.39598	0.65260	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.28845	0.54584	0.79182	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.16796	0.67468	0.74218	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.23614	0.75903	0.67135	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.22409	0.40628	-0.00221	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.30526	0.47472	0.07023	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.29127	0.60404	0.38058	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.34877	0.59458	0.52001	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.37121	0.35576	-0.12551	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.36040	0.33570	0.69681	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.41325	0.68941	0.87370	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.24562	0.41243	0.55515	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.22951	0.29368	0.68247	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.23066	0.78093	0.84710	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.41720	0.46616	0.77961	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.34802	0.48160	0.37580	0.00000	Uiso	1.00
H95	H	0.16979	0.40986	0.64346	0.00000	Uiso	1.00
H96	H	0.23779	0.57768	0.06321	0.00000	Uiso	1.00
H97	H	0.35277	0.79661	-0.12464	0.00000	Uiso	1.00

## 8MR (0,6)

```
data_8MR-0-6
_audit_creation_date      2018-06-06
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6712
_cell_length_b            9.3357
_cell_length_c            9.3358
_cell_angle_alpha         94.7613
_cell_angle_beta          94.7629
_cell_angle_gamma         94.7613
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
Si2 Si  0.04244  0.31641  0.92540  0.00000  Uiso  1.00
Si3 Si  0.43524  0.08460  0.38625  0.00000  Uiso  1.00
Si4 Si  0.15882  0.85907  0.15966  0.00000  Uiso  1.00
Si5 Si  0.32415  0.87746  0.18483  0.00000  Uiso  1.00
Si6 Si  0.44170  0.10091  0.72100  0.00000  Uiso  1.00
Si7 Si  0.05575  0.64692  0.94708  0.00000  Uiso  1.00
Si8 Si  0.05291  0.87437  0.72033  0.00000  Uiso  1.00
Si9 Si  0.15854  0.08584  0.93161  0.00000  Uiso  1.00
Si10 Si  0.04144  0.85387  0.38784  0.00000  Uiso  1.00
Si11 Si  0.43587  0.31523  0.16476  0.00000  Uiso  1.00
Si12 Si  0.54812  0.32206  0.93912  0.00000  Uiso  1.00
Si13 Si  0.93048  0.08538  0.38131  0.00000  Uiso  1.00
Si14 Si  0.66036  0.86361  0.15988  0.00000  Uiso  1.00
Si15 Si  0.82443  0.87155  0.16548  0.00000  Uiso  1.00
Si16 Si  0.93736  0.10550  0.71399  0.00000  Uiso  1.00
Si17 Si  0.55061  0.64859  0.94476  0.00000  Uiso  1.00
Si18 Si  0.93783  0.64451  0.17664  0.00000  Uiso  1.00
Si19 Si  0.55831  0.87554  0.72100  0.00000  Uiso  1.00
Si20 Si  0.82460  0.10166  0.94065  0.00000  Uiso  1.00
Si21 Si  0.66155  0.09426  0.93796  0.00000  Uiso  1.00
Si22 Si  0.55227  0.85095  0.38986  0.00000  Uiso  1.00
Si23 Si  0.93089  0.31464  0.15673  0.00000  Uiso  1.00
Al24 Al  0.32606  0.09572  0.94310  0.00000  Uiso  1.00
Al25 Al  0.44142  0.64216  0.18588  0.00000  Uiso  1.00
O26 O  0.00527  0.31747  0.07695  0.00000  Uiso  1.00
O27 O  0.00501  0.00546  0.37971  0.00000  Uiso  1.00
O28 O  0.15117  0.00745  0.08203  0.00000  Uiso  1.00
O29 O  0.32251  0.93562  0.02733  0.00000  Uiso  1.00
O30 O  0.48331  0.95361  0.72154  0.00000  Uiso  1.00
O31 O  0.47440  0.64720  0.01466  0.00000  Uiso  1.00
O32 O  0.06992  0.48126  0.89683  0.00000  Uiso  1.00
O33 O  0.42755  0.14181  0.55414  0.00000  Uiso  1.00
O34 O  0.23989  0.83656  0.22203  0.00000  Uiso  1.00
O35 O  0.41033  0.46903  0.22327  0.00000  Uiso  1.00
O36 O  0.06728  0.82762  0.55379  0.00000  Uiso  1.00
O37 O  0.23844  0.14315  0.90650  0.00000  Uiso  1.00
O38 O  0.11126  0.22461  0.94054  0.00000  Uiso  1.00
O39 O  0.45234  0.22780  0.30629  0.00000  Uiso  1.00
O40 O  0.11197  0.85998  0.29885  0.00000  Uiso  1.00
O41 O  0.36498  0.73463  0.19593  0.00000  Uiso  1.00
O42 O  0.36473  0.07086  0.78049  0.00000  Uiso  1.00
O43 O  0.04084  0.72779  0.80140  0.00000  Uiso  1.00
O44 O  0.49278  0.23510  0.81021  0.00000  Uiso  1.00
O45 O  0.35854 -0.00081  0.31714  0.00000  Uiso  1.00
O46 O  0.12840  0.72049  0.04386  0.00000  Uiso  1.00
O47 O  0.98476  0.71789  0.32319  0.00000  Uiso  1.00
```

O48	O	0.12446	0.97041	0.79577	0.00000	Uiso	1.00
O49	O	0.37434	0.23521	0.05011	0.00000	Uiso	1.00
O50	O	0.51306	0.33331	0.09198	0.00000	Uiso	1.00
O51	O	0.50183	0.98511	0.37781	0.00000	Uiso	1.00
O52	O	0.66322	0.01703	0.08764	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.82695	0.95192	0.01763	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.98177	0.96293	0.72609	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.98609	0.65308	0.03940	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.56949	0.48450	0.89552	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.91497	0.12888	0.54677	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74263	0.82182	0.19544	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.91332	0.47864	0.20161	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57897	0.83940	0.55878	0.00000	Uiso	1.00
O61	O	0.74312	0.13891	0.89887	0.00000	Uiso	1.00
O62	O	0.62133	0.24027	0.95479	0.00000	Uiso	1.00
O63	O	0.94206	0.23262	0.30223	0.00000	Uiso	1.00
O64	O	0.62510	0.88839	0.31079	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.86674	0.72758	0.14458	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.86430	0.08217	0.79330	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.54373	0.72524	0.79347	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.98646	0.24899	0.78900	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.86323	0.97930	0.30147	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.61694	0.73431	0.05154	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.50877	0.70321	0.32201	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.62325	0.98114	0.80796	0.00000	Uiso	1.00
O73	O	0.86481	0.23495	0.04868	0.00000	Uiso	1.00
N74	N	0.25750	0.48396	0.01684	0.00000	Uiso	1.00
N75	N	0.21443	0.65383	0.62213	0.00000	Uiso	1.00
N76	N	0.38740	0.72996	0.53387	0.00000	Uiso	1.00
N77	N	0.38789	0.42704	0.69022	0.00000	Uiso	1.00
N78	N	0.29654	0.45747	0.42720	0.00000	Uiso	1.00
N79	N	0.33519	0.66380	0.83407	0.00000	Uiso	1.00
Cu80	Cu	0.31811	0.57593	0.62723	0.00000	Uiso	1.00
H81	H	0.17866	0.58791	0.67024	0.00000	Uiso	1.00
H82	H	0.19015	0.66994	0.52284	0.00000	Uiso	1.00
H83	H	0.23562	0.38079	-0.01517	0.00000	Uiso	1.00
H84	H	0.29866	0.47823	0.09548	0.00000	Uiso	1.00
H85	H	0.43082	0.68467	0.49364	0.00000	Uiso	1.00
H86	H	0.40843	0.81177	0.60957	0.00000	Uiso	1.00
H87	H	0.37141	0.37559	0.77654	0.00000	Uiso	1.00
H88	H	0.39650	0.34723	0.61232	0.00000	Uiso	1.00
H89	H	0.28268	0.35009	0.43606	0.00000	Uiso	1.00
H90	H	0.34113	0.46339	0.36685	0.00000	Uiso	1.00
H91	H	0.21854	0.75246	0.68105	0.00000	Uiso	1.00
H92	H	0.43786	0.47891	0.72392	0.00000	Uiso	1.00
H93	H	0.36358	0.77630	0.44856	0.00000	Uiso	1.00
H94	H	0.25546	0.49353	0.36389	0.00000	Uiso	1.00
H95	H	0.21903	0.54236	0.05926	0.00000	Uiso	1.00
H96	H	0.38810	0.66187	0.87617	0.00000	Uiso	1.00
H97	H	0.30365	0.59878	-0.10238	0.00000	Uiso	1.00
H98	H	0.32385	0.76904	-0.14350	0.00000	Uiso	1.00