

Computational design of triple-atom catalysts for electrocatalytic nitrogen reduction on g-C₃N₃

MAIN TEXT

S1. The adsorption Gibbs free energy of *N₂ on TM₃@C₃N₃

Supplementary Table 1. DFT-calculated the adsorption Gibbs free energy of *N₂ on TM₃@C₃N₃ via the end-on and side-on mode.

System	end-on (eV)	side-on (eV)
Ti	-3.10	-3.09
V	-0.72	-0.89
Cr	-0.48	-0.49
Mn	-0.38	-0.54
Fe	-0.49	-0.73
Co	-0.67	-0.76
Ni	-0.93	-0.92
Y	-0.01	-2.87
Zr	-1.61	-3.38
Nb	-4.06	-5.12
Mo	-0.96	-0.96
Ru	-0.29	0.16
Rh	-1.03	-0.51
Pd	-0.82	-0.82
Hf	-1.76	-3.42
Ta	-0.63	-2.58
W	-1.03	-2.81
Re	-0.72	0.35
Os	-1.20	-0.94
Ir	-1.01	-0.38
Pt	-1.59	-0.68



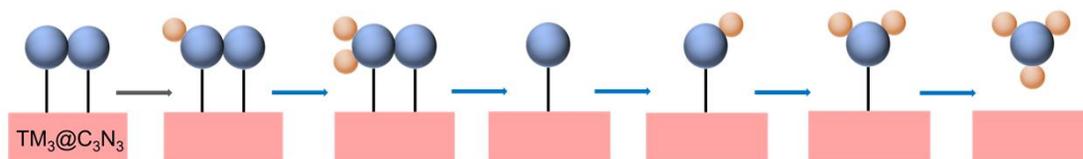
© The Author(s) 2022. Open Access This article is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), which permits unrestricted use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium or

format, for any purpose, even commercially, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons license, and indicate if changes were made.

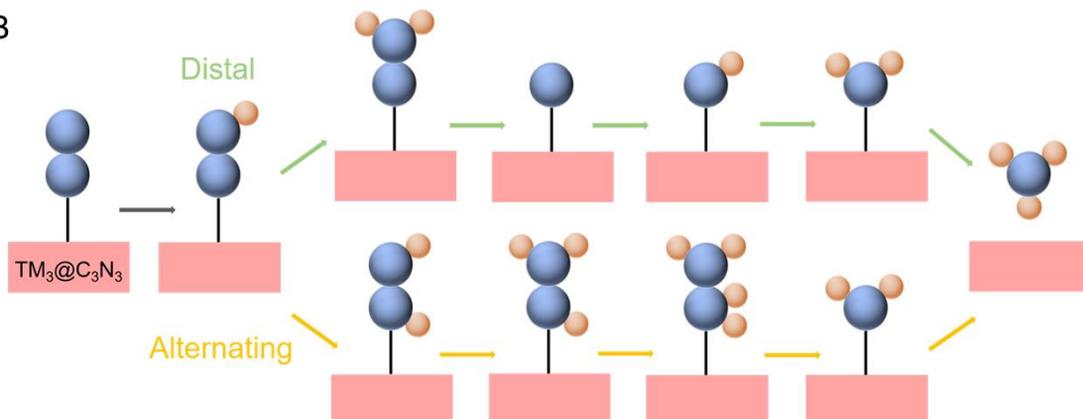


11 **S2. Schematic illustrations of three mechanism towards NH_3 formation on $\text{TM}_3@\text{C}_3\text{N}_3$**

A **Consecutive**



B



12

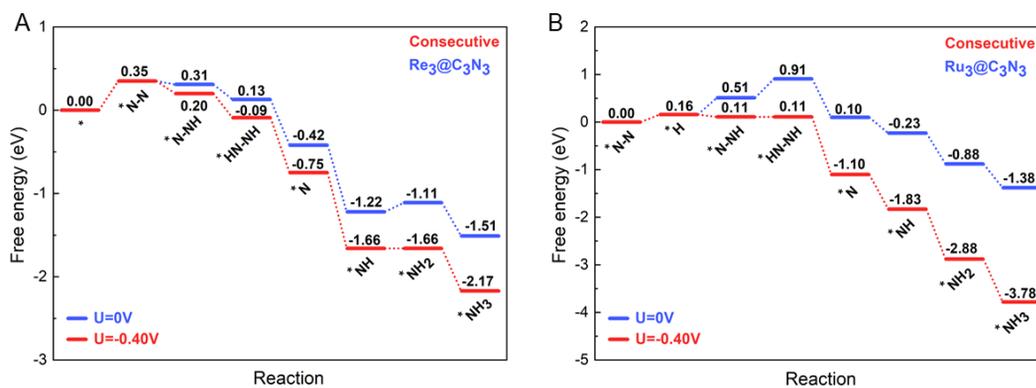
13 **Supplementary Figure 1.** (A) Schematic illustration of Consecutive mechanism towards NH_3 formation
 14 on $\text{TM}_3@\text{C}_3\text{N}_3$; (B) Two other possible path diagrams (Distal and Alternating) for NRR.

15

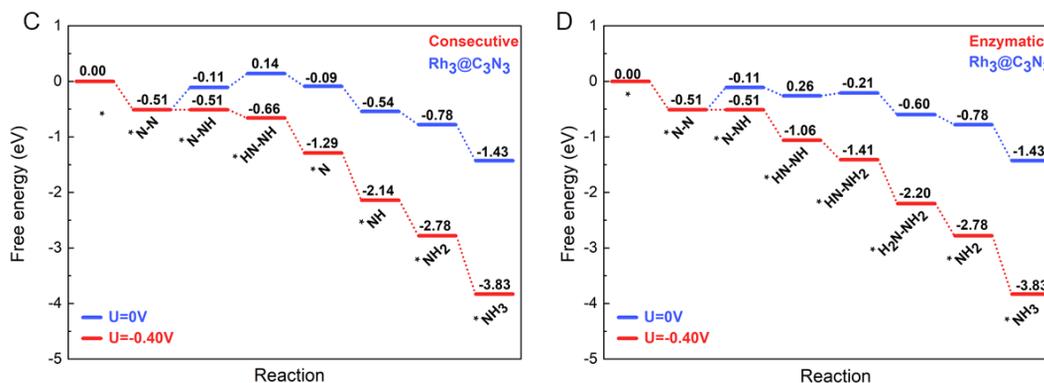
16

17 **S3. Gibbs free energy diagrams for N₂ electroreduction on TM₃@C₃N₃**

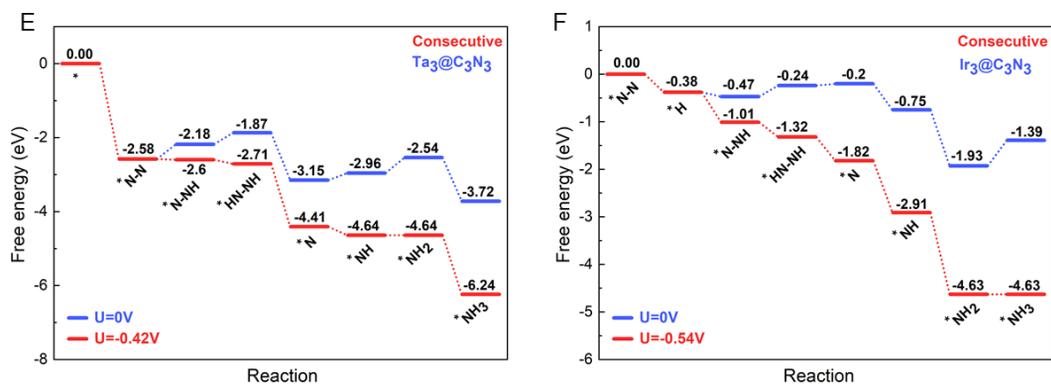
18



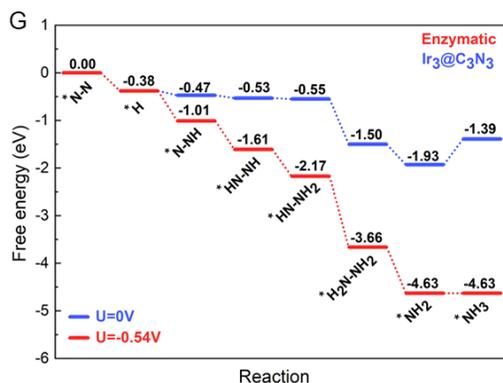
19



20



21

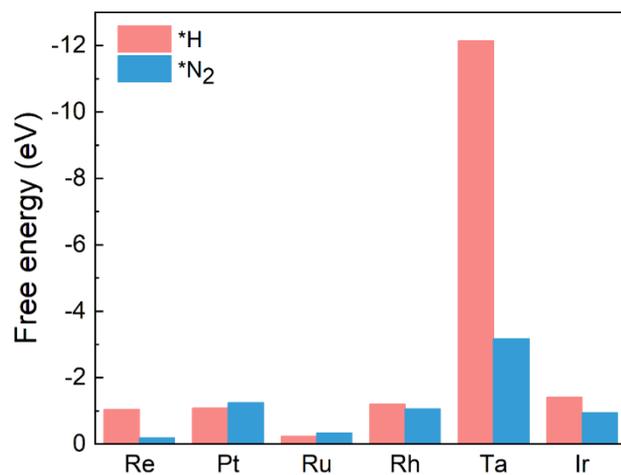


22 **Supplementary Figure 2.** Gibbs free energy diagrams for N₂ electroreduction through consecutive
 23 mechanism on (A) Re₃@C₃N₃; (B) Ru₃@C₃N₃; (C) Rh₃@C₃N₃; (E) Ta₃@C₃N₃ and (F) Ir₃@C₃N₃,
 24 respectively and through enzymatic mechanism on (D) Rh₃@C₃N₃ and (G) Ir₃@C₃N₃.

25

26

27 **S4. Comparison of ΔE_{*H} and ΔE_{*N_2} on $TM_3@C_3N_3$ catalysts**



28

29 **Supplementary Figure 3.** Comparison of ΔE_{*H} and ΔE_{*N_2} on $TM_3@C_3N_3$ catalysts (TM = Re, Pt, Ru,
 30 Rh, Ta, Ir).

31

32

33 **S5. Atomic positions of TM₃@C₃N₃ models**

34 Ti₃@C₃N₃

35 1.0000000000000000

36 12.3253002167000005 0.0000000000000000 0.0000000000000000

37 0.0000000000000000 14.2330999374000005 0.0000000000000000

38 0.0000000000000000 0.0000000000000000 20.0000000000000000

39 C N Ti

40 24 24 3

41 Direct

42 0.0465165384292677 0.1044376609704347 0.1384616865280872

43 0.2058710392222501 0.1830528038950420 0.1370437806781099

44 0.7645233199670576 0.1830965978459269 0.1373444925111897

45 0.9238851699107843 0.1044470391425798 0.1384625735219351

46 0.2662691360188202 0.2735983599085415 0.1347673035560667

47 0.4257153922976919 0.3534366062388455 0.1215146237221694

48 0.5444974233597816 0.3533977421603803 0.1216208634113935

49 0.7039420478449222 0.2736267167676851 0.1351958369774304

50 0.2591088611537958 0.4319240768398940 0.1270849095705999

51 0.7109240958034024 0.4319273092933250 0.1274523134376201

52 0.2045996911049759 0.0245821558229642 0.1395190594140464

53 0.7657879949274249 0.0245991934729499 0.1396101629517930

54 0.0440806741355310 0.6054296630622693 0.1424587999755930

55 0.2036019904287989 0.6852096634981850 0.1292983815404011

56 0.7667055103253403 0.6851542716965691 0.1291858885889182

57 0.9261206800221256 0.6054116873762384 0.1424175759025795

58 0.2640279432238340 0.7748335502265870 0.1288921010978134

59 0.4264989707577236 0.8598339352201207 0.1279829485876189

60 0.5440191147607013 0.8598561442023933 0.1278577111323819

61 0.7064673786712538 0.7748377347734555 0.1286977993568423

62 0.2657662782608425 0.9344654248709514 0.1385671319427405

63 0.7047494133031066 0.9344917308666641 0.1385177986552742

64 0.1990202942171717 0.5213646132547983 0.1294798197994410

65 0.7711162017993943 0.5213905637885650 0.1296513573116017

66 0.0965507264301942 0.1879645736483178 0.1366561013571054

67 0.2641396474000107 0.1036236942227834 0.1379508329719774

68 0.7062300168788260 0.1036513231752294 0.1383320151081380

69 0.8738130277607726 0.1880048567027973 0.1368131430918844

70 0.2063624348650040 0.3530850072645331 0.1375768479250478

71 0.3750655312180576 0.2721442054432193 0.1313043200642991

72 0.5951802430529887 0.2721130987975487 0.1315232313498937

73	0.7637211481843724	0.3531865010298891	0.1381847292203444
74	0.3698527983621044	0.4375005411901952	0.1107865207200364
75	0.6003346636322391	0.4374453758723405	0.1109382023202103
76	0.0956246869215731	0.0203259364572544	0.1402288268877835
77	0.8747578661059685	0.0203535417783359	0.1401070595549606
78	0.0986045479710879	0.6884256603201708	0.1414689338920917
79	0.2596269808997013	0.6025298375572649	0.1153968845803707
80	0.7105396247893386	0.6025021561742496	0.1154589049030474
81	0.8717003602489124	0.6883984616926174	0.1413907238996558
82	0.2091060675750880	0.8527360546952041	0.1402146087707243
83	0.3743951757530087	0.7736209470462603	0.1148784464074806
84	0.5960728936875058	0.7736546822770406	0.1145750778368803
85	0.7613197640497243	0.8527182091651473	0.1402033127227152
86	0.3737624571937050	0.9403569557976268	0.1364143434797405
87	0.5967258478084815	0.9403493207519511	0.1362904606855431
88	0.0944509711095122	0.5204223277083850	0.1415058694066138
89	0.8757062911241408	0.5203971490444907	0.1415436305634190
90	0.3841539069736741	0.5578630148537140	0.0569620352226665
91	0.5856582427867660	0.5579853057767392	0.0571587986679489
92	0.4850288812712447	0.7135759183613095	0.0541511792177746
93			
94	V ₃ @C ₃ N ₃		
95	1.0000000000000000		
96	12.3253002167	0.0000000000	0.0000000000
97	0.0000000000	14.2330999374	0.0000000000
98	0.0000000000	0.0000000000	20.0000000000
99	C N V		
100	24 24 3		
101	Direct		
102	0.0460037588176050	0.1011710737280467	0.1209263263427118
103	0.2053831199254716	0.1797762620717691	0.1209481406611417
104	0.7641050788550885	0.1807138168667279	0.1229658514071446
105	0.9231014807212929	0.1014168049575588	0.1212949555799696
106	0.2663157784999797	0.2702973947517791	0.1225314942724935
107	0.4245912763728654	0.3495794325429387	0.1405588712859611
108	0.5436214844691705	0.3497462070585868	0.1397987609331182
109	0.7036419164362542	0.2712322341111033	0.1247555875105846
110	0.2594866382116976	0.4279207878493096	0.1337469290620845
111	0.7110414119557547	0.4296695379983007	0.1338047731770331
112	0.2044313506405189	0.0214876671711082	0.1251400610080182

113	0.7645692481505364	0.0223807344762648	0.1266657401196269
114	0.0445722110792914	0.6024719263797778	0.1197503345997575
115	0.2035580924941840	0.6813171082195240	0.1352395897592729
116	0.7684907792278324	0.6834740591911057	0.1325065594566226
117	0.9267818448531955	0.6026611735086433	0.1193496284159679
118	0.2638712979947826	0.7716256328271882	0.1366346404897598
119	0.4270468793536537	0.8567311288043626	0.1443678284617462
120	0.5433929662435872	0.8563039494084848	0.1466259997124340
121	0.7061873941310708	0.7728233039829604	0.1372097618522687
122	0.2665748659275735	0.9315363155882750	0.1295888264298739
123	0.7026666193877560	0.9324812544291419	0.1310784996208980
124	0.1995328545337571	0.5185670470755710	0.1322907987597048
125	0.7714575958822039	0.5186728743495905	0.1310455600509144
126	0.0961977663176441	0.1846807765845568	0.1189554373222137
127	0.2636842552890712	0.1006231175772498	0.1242568576439282
128	0.7056447711844172	0.1016086691065752	0.1269994173331952
129	0.8733670406073770	0.1850774176562666	0.1198793381145293
130	0.2072192101399821	0.3506625217148596	0.1184417572910235
131	0.3742353787378576	0.2685104957960434	0.1279698201395973
132	0.5944338355407908	0.2693001577899636	0.1281031072656518
133	0.7631458097874457	0.3505122916274530	0.1226199809255633
134	0.3676618182673224	0.4322875628914176	0.1536745982668535
135	0.5993602279829204	0.4338068590652568	0.1515878676564526
136	0.0954682060638561	0.0170990826801187	0.1237305709595447
137	0.8734100819248951	0.0174614219707792	0.1240834462894398
138	0.0988548035156498	0.6852754717788301	0.1225140449345758
139	0.2596859390406365	0.5988222008514796	0.1477341141072586
140	0.7122532206410170	0.6014340881791966	0.1444686180001185
141	0.8731081369585212	0.6869314644844025	0.1208127446916833
142	0.2097335987132851	0.8491047554705773	0.1238961493233077
143	0.3726049713492898	0.7699681501862798	0.1529111399921845
144	0.5989277550613963	0.7697160401256511	0.1579584578204418
145	0.7589256351880991	0.8504140341846806	0.1232016703203911
146	0.3725932458686998	0.9384674654026099	0.1383244145046802
147	0.5967597302924403	0.9382761061864571	0.1398622035733155
148	0.0956496427331075	0.5175006506386595	0.1190182916761202
149	0.8766787498565165	0.5181072066289403	0.1196996071655931
150	0.4098651931980655	0.6417147304165383	0.2850085898902890
151	0.5097303906205752	0.6039830080593163	0.2727625571708643
152	0.3909420754455795	0.5581881880337107	0.2060209916615037

153	0.5999883732209170	0.5511744606040025	0.2057369674173373
154	0.4779742052874525	0.7311937549600387	0.2216716875732416
155			
156	Cr ₃ @C ₃ N ₃		
157	1.0000000000000000		
158	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
159	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
160	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
161	C	N	Cr
162	24	24	3
163	Direct		
164	0.0460914668299386	0.1037388310129514	0.1221394852148992
165	0.2049704688932909	0.1821656355830419	0.1223610576652062
166	0.7652602224381854	0.1822411375476705	0.1229893949976738
167	0.9240529187023876	0.1037835677229320	0.1223745570975033
168	0.2655503688853970	0.2727035715925913	0.1225778345014720
169	0.4255223831117680	0.3526140886651405	0.1250153585535303
170	0.5447379605504081	0.3526658410441496	0.1251229559756687
171	0.7047258533356912	0.2727943380754476	0.1230645613555607
172	0.2595646167073404	0.4309552264106757	0.1283293552850971
173	0.7106652625703610	0.4310121504888723	0.1286123964089431
174	0.2034839896528436	0.0241661456277053	0.1290052489584867
175	0.7667725958907518	0.0242687894829034	0.1301882733032221
176	0.0439539654724246	0.6051665205676923	0.1349778867738312
177	0.2059250478019997	0.6841651700858303	0.1360527255147066
178	0.7643840107065395	0.6842607009650827	0.1367640588982823
179	0.9262472609229473	0.6052027673494388	0.1352551337793317
180	0.2653101244477920	0.7739351495945859	0.1340095217979240
181	0.4265415768495507	0.8612462487656068	0.1264861868230641
182	0.5437882518144375	0.8613048948991701	0.1270163689479708
183	0.7050578177926609	0.7740326149318348	0.1352175599883561
184	0.2650221194252612	0.9343410671345287	0.1320283769686386
185	0.7052911417882340	0.9344159271722678	0.1333199158203521
186	0.2005150980523590	0.5207410604392817	0.1321779686737410
187	0.7696536128999584	0.5208616908543636	0.1323578074660052
188	0.0961014422274924	0.1870690352772311	0.1183578011429538
189	0.2630754655658661	0.1030928960128550	0.1276450854754613
190	0.7071883976693333	0.1032407192531270	0.1289194775776223
191	0.8740528973469077	0.1870819456341400	0.1183397689869186
192	0.2048516685972593	0.3518743925587123	0.1253918983750669

193	0.3743210996028529	0.2703484090078828	0.1214864274517984
194	0.5959938583991689	0.2704049159612029	0.1217921986232793
195	0.7654809487399842	0.3519466029623691	0.1258622258671081
196	0.3715657512250743	0.4377067415428570	0.1291763013614328
197	0.5986863508405811	0.4377086824857990	0.1292925512794947
198	0.0948250846704995	0.0197721329113276	0.1273190544513083
199	0.8753782901675069	0.0198839509967417	0.1281995519328639
200	0.0992374082665039	0.6880899356416212	0.1365766684130484
201	0.2653703524592342	0.6009891034471398	0.1360215644440086
202	0.7048282970448103	0.6011017297001555	0.1360313728625565
203	0.8710653302596197	0.6881150657126556	0.1374387033754333
204	0.2094817267384490	0.8533554565170335	0.1393537106504827
205	0.3758367709234998	0.7731662052059755	0.1223773372344551
206	0.5946198579791447	0.7732785204897098	0.1232964623016342
207	0.7608172431040059	0.8535014768371753	0.1408694970793705
208	0.3727463642353976	0.9420748178802786	0.1267608241624374
209	0.5976084904514374	0.9421221752549236	0.1275632493453118
210	0.0945178847617782	0.5200588520328550	0.1312604079163515
211	0.8756422222859787	0.5201136500720795	0.1315461259244995
212	0.4234054944333404	0.5719180791822601	0.1313798439017641
213	0.5467516736337807	0.5718350394260913	0.1314205625067346
214	0.4857614568279580	0.7067062339820064	0.0779772975871372
215			
216	Mn ₃ @C ₃ N ₃		
217	1.0000000000000000		
218	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
219	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
220	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
221	C	N	Mn
222	24	24	3
223	Direct		
224	0.0469227696447561	0.1040238927757101	0.1397384696777106
225	0.2055868891361722	0.1834803143385231	0.1366781029564957
226	0.7647915524522017	0.1811879315605559	0.1369997438829872
227	0.9243864631806752	0.1031957505609136	0.1387745028642828
228	0.2654029866336265	0.2744812586505214	0.1344798248819208
229	0.4254833042165531	0.3552822271193196	0.1370996752161399
230	0.5454379430973436	0.3537864388368362	0.1309864554700565
231	0.7047830793266221	0.2720862459235432	0.1349956230247938
232	0.2591102012690739	0.4329804893822032	0.1376357104068373

233	0.7127759937221509	0.4295959150130252	0.1230242776458911
234	0.2056846889419015	0.0251702000798836	0.1406885158779385
235	0.7669279935692627	0.0226702148482087	0.1343940018736194
236	0.0435128069304641	0.6062924295444734	0.1218021482333152
237	0.2034762952097241	0.6859427470359234	0.1278063114393960
238	0.7646597382779172	0.6834063788653271	0.1108272866592371
239	0.9263465611267806	0.6056810260853459	0.1190898776516891
240	0.2642609492216700	0.7765530574927170	0.1252055577431611
241	0.4259920753501070	0.8603113566020587	0.1246042061108281
242	0.5442321407818501	0.8600265451259514	0.1205951081476217
243	0.7042267468519781	0.7745319385216464	0.1111392641116739
244	0.2663335049104940	0.9352626478437140	0.1390758252494383
245	0.7061038310162110	0.9326160978200109	0.1302734628463498
246	0.1986375382150779	0.5227130711834264	0.1345329341810478
247	0.7722387676086494	0.5195906743792298	0.1181808625335911
248	0.0962763457859846	0.1879032584741849	0.1372953049019583
249	0.2646910690667261	0.1045074425172855	0.1379708060755879
250	0.7068842207354250	0.1016479083401544	0.1343538658620157
251	0.8739298084134538	0.1864919095100309	0.1399043152440842
252	0.2049007867482631	0.3536154762761454	0.1324328387222968
253	0.3745124881782605	0.2732376674374533	0.1330926223818882
254	0.5957244252619941	0.2716532719474042	0.1378205732622825
255	0.7664491704635146	0.3507159128988255	0.1310999670976198
256	0.3704977089805406	0.4398444067574273	0.1452149020360503
257	0.6011643830749657	0.4365205733494613	0.1186820631840433
258	0.0966426837123738	0.0203512853672266	0.1419873836061447
259	0.8758863874280707	0.0188611791959651	0.1359756958398486
260	0.0980907810145782	0.6896126463672246	0.1185716695237282
261	0.2604842014819868	0.6040669919215959	0.1401047217495431
262	0.7080639680995219	0.5991566812101116	0.1089509396190912
263	0.8710052488013308	0.6881860845939117	0.1146970835733392
264	0.2090929272607580	0.8535726271088437	0.1385639611816182
265	0.3737769004576292	0.7754808441486709	0.1107951606864185
266	0.5931945772890592	0.7759299638543499	0.1011636909073323
267	0.7615344772861647	0.8507957811839199	0.1243232999649801
268	0.3747210100990457	0.9398614114589490	0.1379525983721015
269	0.5977724508350137	0.9381934073870124	0.1340760407897688
270	0.0934886859783413	0.5212360883547624	0.1263385662494931
271	0.8775808351902714	0.5198951454619877	0.1233017396083760
272	0.4140682418790254	0.5750388305387415	0.1616331686180886

273	0.5560393683491680	0.5662228055463667	0.0986863134888159
274	0.4785119914372604	0.6958714512028669	0.0554829197674556
275			
276	Fe ₃ @C ₃ N ₃		
277	1.000000000000000		
278	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
279	-0.0000246383000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
280	0.1282714703000000	0.8332544928000000	26.9868344453000013
281	C	N	Fe
282	24	24	3
283	Direct		
284	0.0464879905998027	0.1056580620312209	0.0895718911046088
285	0.2050599114847949	0.1856781828373235	0.0892180421436744
286	0.7638936265027167	0.1802273598540063	0.0884271741886305
287	0.9241035592607575	0.1034404291238138	0.0885162453219244
288	0.2658068033985803	0.2766200786710515	0.0884723652947968
289	0.4262935656288869	0.3566656175393366	0.0923601370912372
290	0.5458436507518367	0.3543110726265732	0.0898579792124827
291	0.7040105639917241	0.2709797373365600	0.0882816122237554
292	0.2608110936236296	0.4352146645021737	0.0894789704629885
293	0.7145265853286308	0.4290416963410602	0.0846036717962339
294	0.2051582890373153	0.0272236619058322	0.0922876599002951
295	0.7672450976948060	0.0220565449068275	0.0858015721992465
296	0.0442175848319260	0.6079320572338633	0.0803183510465038
297	0.2030701926949301	0.6878208506321020	0.0868079894654787
298	0.7639850415214591	0.6829087827266059	0.0781399235262655
299	0.9268122873064153	0.6064199561646756	0.0795720375583633
300	0.2632857922582050	0.7781872363239872	0.0856843141686863
301	0.4248365702658417	0.8615096468439837	0.0834376517398471
302	0.5433922088351715	0.8595146745680201	0.0810143103223333
303	0.7026828754460741	0.7724769571450464	0.0771763989192061
304	0.2655300022956136	0.9370503272591376	0.0920006088664621
305	0.7060417002717705	0.9319842476308555	0.0840912313099022
306	0.2001595296006660	0.5248937000937328	0.0877459009836171
307	0.7740783841389705	0.5189200246738899	0.0819419150052814
308	0.0957707706158937	0.1898412813777614	0.0879407942138234
309	0.2641431959058202	0.1065986786735198	0.0913369253598495
310	0.7066083662940906	0.1005881435663174	0.0865033816019111
311	0.8729428152466798	0.1860924996329374	0.0900507753972882
312	0.2062951308487664	0.3563590146424436	0.0856679820664635

313	0.3745233176772952	0.2748365182335841	0.0899084139578226
314	0.5952984478889186	0.2709742734675885	0.0907770374969628
315	0.7669656078830329	0.3491908068109253	0.0856290830218861
316	0.3722614886311705	0.4421579459187519	0.0957206275323870
317	0.6025782764786564	0.4378923648669223	0.0862371151748789
318	0.0963896512526334	0.0220989894896796	0.0919283944044894
319	0.8762856094061116	0.0188278249348629	0.0861261808040131
320	0.0974898973306471	0.6916100845311408	0.0803144597374152
321	0.2608923056885585	0.6055175891280121	0.0943018475729363
322	0.7082656211321108	0.5985466095080533	0.0796686496497751
323	0.8708389815150790	0.6882987819521479	0.0778522389446856
324	0.2077575314177057	0.8560791310606133	0.0926003653654236
325	0.3732111105683742	0.7763052770069349	0.0772076629158091
326	0.5905802202356411	0.7720572177042874	0.0730508613691649
327	0.7605433954247857	0.8502777125650106	0.0815805861440248
328	0.3741654756316234	0.9417746518094853	0.0905223888907369
329	0.5973083433757334	0.9383707128958886	0.0863187720197980
330	0.0952606003554249	0.5232506351446828	0.0809253839506727
331	0.8796297059065661	0.5196744078520322	0.0818824487347758
332	0.4084556401241354	0.5706937824868827	0.1145696301390110
333	0.5616970736463963	0.5649399029868762	0.0817604047338961
334	0.4790684677476441	0.6847892187809740	0.0531694639482961
335			
336	Co ₃ @C ₃ N ₃		
337	1.0000000000000000		
338	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
339	-0.0000246383000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
340	0.1282714703000000	0.8332544928000000	26.9868344453000013
341	C N Co		
342	24 24 3		
343	Direct		
344	0.0464510883359076	0.1050778559150865	0.0930014534482902
345	0.2053896716125024	0.1843928370671626	0.0910165131747714
346	0.7644392708328527	0.1807656592778632	0.0920071760092811
347	0.9243042261215030	0.1035736912660525	0.0926645490789571
348	0.2657553124725101	0.2754496392197683	0.0896283403754526
349	0.4257504231143435	0.3570527801791719	0.0906562231492014
350	0.5462582932270557	0.3547701258402776	0.0881694895961299
351	0.7046732401525958	0.2717693856697574	0.0905103316204292
352	0.2594365017088400	0.4338263145074505	0.0894890551859238

353	0.7141292344232328	0.4292910636019623	0.0816040918682753
354	0.2044684578835509	0.0259967959329425	0.0929830373058480
355	0.7675418620381788	0.0225260663390248	0.0896722386507016
356	0.0438806009159385	0.6079200821171135	0.0829045645625339
357	0.2046134560363162	0.6866204565330278	0.0860938738895275
358	0.7625412900446459	0.6827942484049185	0.0769372562683781
359	0.9256030175765247	0.6065787735837099	0.0812459425544390
360	0.2645062776138826	0.7765010433875656	0.0855707237021976
361	0.4248057554206454	0.8619244420700676	0.0834805184156725
362	0.5442266700869683	0.8613747188113444	0.0816332568182915
363	0.7025720318915778	0.7734246627814878	0.0777334837941331
364	0.2647471592247702	0.9356799659816345	0.0916989307231389
365	0.7065089497165148	0.9324459075324949	0.0872478888401969
366	0.1990793103447152	0.5235286906514259	0.0876198739419663
367	0.7727269005729888	0.5196221668067431	0.0786524115024760
368	0.0961425961293147	0.1889271709308666	0.0915062422987314
369	0.2640414102518379	0.1050556090840691	0.0915054036774496
370	0.7069910305451768	0.1011614998005351	0.0900787269135195
371	0.8734243421244315	0.1863692235503070	0.0939801442522854
372	0.2053208942147129	0.3545369843625261	0.0877149706925206
373	0.3747576078890451	0.2747669216609054	0.0895863429236336
374	0.5955969687921465	0.2718785591432685	0.0933050512595341
375	0.7671754839559223	0.3495604515235020	0.0862049691308170
376	0.3712904031460104	0.4421442206221491	0.0934050746412196
377	0.6025375312187220	0.4372859571874045	0.0799026258786876
378	0.0958510076479470	0.0212067935589558	0.0941193350669937
379	0.8763619581157058	0.0190403218842006	0.0903968433963740
380	0.0976124698382427	0.6906682929070688	0.0825274100204481
381	0.2624468162926575	0.6036136929825019	0.0902492059595387
382	0.7068925884358038	0.5988686442581707	0.0736812087884701
383	0.8693859626526635	0.6882023307721991	0.0801588036118138
384	0.2083092282167083	0.8549945572079112	0.0920210234058175
385	0.3747902623341341	0.7759402614483010	0.0777109013874947
386	0.5916075393381764	0.7752987299806765	0.0720874953124185
387	0.7605988881993947	0.8508466795310368	0.0842855790431565
388	0.3737979325617207	0.9418605688476266	0.0898254036391605
389	0.5974728496609821	0.9396609800114095	0.0886388263348623
390	0.0934208394489856	0.5223976639555722	0.0845453128012916
391	0.8784680505146364	0.5203524361168549	0.0819568164648783
392	0.4086321146441518	0.5699144397064824	0.0985355329706547

393	0.5625194094557718	0.5609576703292380	0.0657930875210791
394	0.4827047680064577	0.6959615911582023	0.0524162671309546
395			
396	Ni ₃ @C ₃ N ₃		
397	1.0000000000000000		
398	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
399	-0.0000246383000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
400	0.1282714703000000	0.8332544928000000	26.9868344453000013
401	C N Ni		
402	24 24 3		
403	Direct		
404	0.0458005115933841	0.1052681925768219	0.0924507636587723
405	0.2042929296501170	0.1837797975420396	0.0866835509586666
406	0.7650015736040474	0.1815425293182504	0.0958057577853804
407	0.9243106342508416	0.1044392014492997	0.0933926518941377
408	0.2646395844305553	0.2740783736906388	0.0844401561181140
409	0.4245696054133628	0.3536604868272786	0.0878404415856694
410	0.5461157873840947	0.3526486787925326	0.0868843921054585
411	0.7049631814953706	0.2723577940985416	0.0949111324091990
412	0.2585657299288452	0.4318088685346696	0.0875945340241600
413	0.7127173249469564	0.4298967427350994	0.0840503086752744
414	0.2032249273983421	0.0258408527485824	0.0925074212898176
415	0.7677350164270798	0.0236800313074944	0.0908403354268194
416	0.0440198801396133	0.6080019569976968	0.0830432876670308
417	0.2060337986433260	0.6858003654522288	0.0869034797094037
418	0.7632808337672091	0.6846987994020249	0.0733197981971041
419	0.9258081852574868	0.6076597488312097	0.0819630524546454
420	0.2658142588749787	0.7770555124980648	0.0867316944218359
421	0.4252822218431073	0.8643878535511070	0.0855393249365248
422	0.5450352882891175	0.8640442715659038	0.0819639892482312
423	0.7030636169728832	0.7763011172493008	0.0742856039584096
424	0.2640653311518575	0.9360443339800893	0.0922438320249610
425	0.7074415784700567	0.9339988025796273	0.0876118570500034
426	0.1991832457277607	0.5225513391989705	0.0871503734893627
427	0.7718401141466916	0.5210315362830814	0.0798602144515318
428	0.0952769231285543	0.1888043893126159	0.0879520955621524
429	0.2628004610170009	0.1045512024839241	0.0881286288793593
430	0.7073035055281277	0.1022088900506663	0.0933574726836269
431	0.8739444228232756	0.1872088013711709	0.0968641833932265
432	0.2043331698265338	0.3529912237451708	0.0833616607359496

433	0.3740546400452559	0.2719316902759193	0.0841160673191097
434	0.5955950785405110	0.2708317544575948	0.0951229305390047
435	0.7660594996122067	0.3510465230695270	0.0926810266270719
436	0.3701172571282326	0.4369946684285122	0.0931551455821747
437	0.6017329198003583	0.4344889148575705	0.0771948986090180
438	0.0948552913273041	0.0212456254986926	0.0956011014131946
439	0.8764387731021261	0.0203207202561318	0.0899293910952824
440	0.0993790166450802	0.6906563572295079	0.0828365728329941
441	0.2630461780936912	0.6026043268968112	0.0913411878239131
442	0.7083946023572609	0.6005869646112257	0.0690744296488795
443	0.8696381466566713	0.6897089046327257	0.0785783236832568
444	0.2081091262187010	0.8550474990690488	0.0916535189571414
445	0.3761809776320051	0.7781376056212822	0.0814869246131438
446	0.5920541942600623	0.7794172878506904	0.0691299438097203
447	0.7614953187376514	0.8529427300413470	0.0817866974808124
448	0.3730905376959187	0.9437354280212239	0.0912471637165475
449	0.5985675620985483	0.9407007333712172	0.0915099377006507
450	0.0934443255705008	0.5224099730232732	0.0834950705707355
451	0.8768561003037011	0.5219182448986144	0.0859795787292910
452	0.4064420431897513	0.5631112442596143	0.0975790271991390
453	0.5681564270773737	0.5583865730354003	0.0603306629602795
454	0.4823882967765254	0.6918141624199706	0.0668482332938297
455			
456	Y ₃ @C ₃ N ₃		
457	1.0000000000000000		
458	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
459	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
460	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
461	C	N	Y
462	24	24	3
463	Direct		
464	0.0464172407684914	0.1041117915470164	0.1191576026743388
465	0.2043341840385556	0.1844231605732598	0.1146347415676787
466	0.7656735159555351	0.1840321668004875	0.1165754950990243
467	0.9238650985808811	0.1039903010753693	0.1196735452191358
468	0.2629483170625218	0.2761263238208487	0.1151174450739725
469	0.4239278975741562	0.3526139805714245	0.1276772020870265
470	0.5457952936647101	0.3525064796725708	0.1279132135589478
471	0.7070032449197935	0.2757283903372160	0.1168820974178668
472	0.2585139409822748	0.4340427856209232	0.1297160341561809

473	0.7113875620712372	0.4337119387437358	0.1308115018758570
474	0.2056860184327251	0.0259678093037640	0.1187003955133201
475	0.7648490613380574	0.0255781666871195	0.1206929185076291
476	0.0450514126532764	0.6037851609661248	0.1140444345827654
477	0.2016773215590532	0.6861060048919271	0.1287014381718905
478	0.7677865031499863	0.6857561065055008	0.1290598446542520
479	0.9245118899861725	0.6036194304254632	0.1144485687307483
480	0.2633558402341800	0.7768955228569562	0.1309217525935391
481	0.4271378149584794	0.8603637145240171	0.1398058467796244
482	0.5429522694863023	0.8603125924329745	0.1404654723116869
483	0.7065554130336407	0.7766002849440241	0.1320493785675187
484	0.2679190236353835	0.9363054842164624	0.1223726536493394
485	0.7026006799977363	0.9360042330311912	0.1241685310463818
486	0.2008216617976395	0.5208268375540992	0.1284962024212352
487	0.7690288752436957	0.5204700782981567	0.1293510115874028
488	0.0951312554994041	0.1879535136197399	0.1167547914192921
489	0.2639059290439513	0.1058006013018660	0.1147747258045169
490	0.7063401734914536	0.1053497403049801	0.1176332734374299
491	0.8749381855560489	0.1877286128777567	0.1175244931386670
492	0.2038378273780738	0.3526761618558079	0.1197686514297629
493	0.3746127321276440	0.2749119186960794	0.1105904458874076
494	0.5953010778410180	0.2744618534952287	0.1117382935163509
495	0.7661534099269717	0.3521657734925362	0.1217995472237333
496	0.3711038846932836	0.4331933274645489	0.1486983441555214
497	0.5982756552710177	0.4334017326351544	0.1484353323574320
498	0.0969294002357288	0.0204844983849463	0.1210841090605022
499	0.8736396140475252	0.0202329300423284	0.1219817531198203
500	0.0992251993320210	0.6885901968862472	0.1114121262174987
501	0.2560222304542873	0.6052024023684018	0.1473237356706862
502	0.7131641119764955	0.6048552953326337	0.1469749735783243
503	0.8703236917988717	0.6883903192955394	0.1118063123765387
504	0.2108007806981377	0.8537168993344186	0.1150751040198568
505	0.3702162543238431	0.7743528037386110	0.1516263847255470
506	0.5995710114547539	0.7741931421159512	0.1527072018784997
507	0.7594659298034593	0.8534010976226025	0.1166595847434122
508	0.3732746955482042	0.9425422137516749	0.1319833368085038
509	0.5971034633652764	0.9423922671682382	0.1332306519704128
510	0.0924909077701509	0.5209587965234717	0.1181566892830318
511	0.8775415431719550	0.5207225397334051	0.1195345952235665
512	0.3296956035753483	0.5300400121000123	0.2286592561274066

513	0.6368825429105307	0.5312994525581511	0.2282027531826276
514	0.4837827835800630	0.7395530728990211	0.2310461917962942
515			
516	Zr ₃ @C ₃ N ₃		
517	1.0000000000000000		
518	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
519	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
520	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
521	C	N	Zr
522	24	24	3
523	Direct		
524	0.0460439193295294	0.1044150089456524	0.1194954225657211
525	0.2041954566343544	0.1843882578088019	0.1161561700367334
526	0.7653335648108460	0.1841571596311286	0.1178311482809662
527	0.9236339803868583	0.1043295417437781	0.1198871715416928
528	0.2630966995203989	0.2758954611130296	0.1166768311779214
529	0.4247037984288266	0.3535591541859565	0.1244919274482135
530	0.5449454678488921	0.3535578760081428	0.1250139772180062
531	0.7066366918134743	0.2757439495754982	0.1184592530479558
532	0.2579485857476455	0.4336674175392597	0.1302777966826491
533	0.7117073197578400	0.4334920821689403	0.1318573405260945
534	0.2048375442619156	0.0259514786706568	0.1204354989502328
535	0.7649414238432674	0.0257108710326806	0.1218984192505733
536	0.0448017620450035	0.6046290099612047	0.1203740148194273
537	0.2038077509713780	0.6860394423648166	0.1290026884445862
538	0.7657765303666367	0.6857685819354391	0.1295076696492479
539	0.9247521090444278	0.6044693149781358	0.1207730418024636
540	0.2642486857942606	0.7761789536430965	0.1304446682464436
541	0.4270190984706392	0.8615543475889563	0.1391102768460595
542	0.5426512621066287	0.8614734526412785	0.1394442178831896
543	0.7054154455484175	0.7759498974129919	0.1311447697061568
544	0.2670450478539824	0.9362999036467017	0.1242768911345837
545	0.7029440056914159	0.9360183446226247	0.1253991943040212
546	0.2002429663284278	0.5209034669080363	0.1309500246354884
547	0.7694428693256675	0.5207334985204507	0.1321924952440543
548	0.0949843098090749	0.1881580708021535	0.1170414027437050
549	0.2634381716505306	0.1055646982387865	0.1171982666683944
550	0.7061754605347762	0.1053375980158803	0.1194875433087168
551	0.8745736207945154	0.1879966266410883	0.1176846215075991
552	0.2035022422935676	0.3526996216596927	0.1228034070918850

553	0.3739969469702565	0.2746438142511758	0.1113325846878872
554	0.5957914784982241	0.2745771187839323	0.1124008115881436
555	0.7661907638792822	0.3524568612145880	0.1249243470354446
556	0.3717585902698243	0.4356756995636635	0.1431011803651481
557	0.5976158004581690	0.4357129883366342	0.1439010218217401
558	0.0961157676945862	0.0206374299399012	0.1218401526946535
559	0.8736768149570471	0.0205097134567881	0.1225117423388277
560	0.0990648671698721	0.6886989631507828	0.1170404547052531
561	0.2601147835114894	0.6044133496069234	0.1442976361351595
562	0.7094315752598752	0.6042653844807487	0.1448793194353719
563	0.8704417788668968	0.6884778025532363	0.1173210963660028
564	0.2106831450653202	0.8537283830141418	0.1175190701501121
565	0.3726426413397130	0.7743469385740296	0.1489490561343033
566	0.5968658002023385	0.7741563648821584	0.1494617522438411
567	0.7592667761166040	0.8534670241751714	0.1186573665135460
568	0.3728412119876101	0.9431740756780204	0.1332294167906016
569	0.5970162292499676	0.9429683016119796	0.1338744202880729
570	0.0921832583001468	0.5211332477114431	0.1243790960421981
571	0.8775403180945845	0.5209911172409458	0.1256371753702125
572	0.3626947022937905	0.5416944355681760	0.2147701661970185
573	0.6060384425495180	0.5419337613793584	0.2152938709203085
574	0.4843524702516865	0.7254840528213224	0.2194321064133663
575			
576	Nb ₃ @C ₃ N ₃		
577	1.0000000000000000		
578	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
579	-0.0000246383000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
580	0.1282714703000000	0.8332544928000000	26.9868344453000013
581	C	N	Nb
582	24	24	3
583	Direct		
584	0.0469343684839655	0.1057347069367206	0.0784467472816796
585	0.2063523774792524	0.1841680572214665	0.0795286233149265
586	0.7648872804376144	0.1842231438630522	0.0792855360533555
587	0.9242741091247064	0.1057349518204214	0.0784128278143253
588	0.2659769488115459	0.2753652472801829	0.0810433907778841
589	0.4257035564804080	0.3552345434498790	0.0901839514878704
590	0.5453489479173123	0.3552729718605614	0.0900792961130018
591	0.7052017918422597	0.2754297386806514	0.0807593954796920
592	0.2579969679289237	0.4327195619657067	0.0889791074988305

593	0.7129652361497910	0.4328309978688368	0.0886287944268966
594	0.2048214396800718	0.0255021237132748	0.0794081342825793
595	0.7663797473909145	0.0255203349874625	0.0795836071899586
596	0.0453474255008968	0.6066778145679239	0.0798846594966836
597	0.2055223453664509	0.6851487056174985	0.0899782075596127
598	0.7655608263849235	0.6852124842176331	0.0899901328862368
599	0.9258897554704830	0.6066826231637567	0.0798676810244685
600	0.2655593034873454	0.7747841384477049	0.0904456604934122
601	0.4271176796516483	0.8615940655120843	0.0899575926912071
602	0.5438181311158889	0.8616295729096692	0.0899623833340564
603	0.7054886884476890	0.7748562380553294	0.0905238360724946
604	0.2659075278898727	0.9352101559331110	0.0813374145115717
605	0.7052027814505488	0.9353009554252936	0.0814876809865767
606	0.1992132713196567	0.5209434756373363	0.0883268033732575
607	0.7717380353823448	0.5210583432713771	0.0880952256084538
608	0.0970618408730151	0.1890965102304033	0.0790340069475727
609	0.2645212670844819	0.1046955183051975	0.0801744235615563
610	0.7067126116578896	0.1047595825829683	0.0801840308575622
611	0.8741819475532333	0.1891478697965321	0.0786012350962882
612	0.2056885863931208	0.3534816312957005	0.0813534575365222
613	0.3758037152464188	0.2752711459000037	0.0813944888576418
614	0.5953767783442109	0.2752905063010801	0.0812187444008013
615	0.7654376621206224	0.3535810437308617	0.0809877089550581
616	0.3696134212378884	0.4373579513894100	0.1011323520322801
617	0.6011982004782443	0.4374174006269950	0.1009292149758934
618	0.0960202380869451	0.0215016844927115	0.0782888479302061
619	0.8752075104102596	0.0214728787416531	0.0786420796791367
620	0.1004574979305223	0.6891414517348021	0.0808273239157143
621	0.2603069976014141	0.6011500491578737	0.1003786749150986
622	0.7104933216457877	0.6012225730235324	0.1003119171731363
623	0.8708287622836868	0.6891875939587233	0.0808842995274643
624	0.2105615781648714	0.8528511791570291	0.0813490541820013
625	0.3759360307282919	0.7744640099208054	0.1018432918181706
626	0.5948218550613480	0.7744919370319562	0.1018069699650924
627	0.7606150326094532	0.8529407443798706	0.0814686843444384
628	0.3737546762175474	0.9415130625293204	0.0824930470080606
629	0.5973465466821584	0.9415826829716043	0.0825943987215896
630	0.0937486488594167	0.5220408500930417	0.0801839193901604
631	0.8774077488126930	0.5221137318550801	0.0800141296361958
632	0.3806821739061259	0.5499504985755341	0.1474869195495284

633	0.5892214860961887	0.5498831485705673	0.1474164291352242
634	0.4849953747196588	0.7081173812397976	0.1485734961285931
635			
636	Mo ₃ @C ₃ N ₃		
637	1.000000000000000		
638	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
639	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
640	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
641	C	N	Mo
642	24	24	3
643	Direct		
644	0.0462953248344978	0.1032207083266748	0.1493267199426678
645	0.2054981114223789	0.1817157056385530	0.1479837892188312
646	0.7650334198380165	0.1819851401628081	0.1483445468442507
647	0.9239565429536958	0.1033119465692265	0.1493709750236436
648	0.2657281151962869	0.2726016629076682	0.1451465181471522
649	0.4249627276570571	0.3512570739675049	0.1294913414870083
650	0.5454132202942642	0.3513631999246293	0.1296354670598670
651	0.7047137755408651	0.2728638006444545	0.1456137034859532
652	0.2583927665907441	0.4293745957412248	0.1285703191835755
653	0.7118581149412945	0.4296235364752852	0.1290731537497715
654	0.2037464027494777	0.0231829769463754	0.1428755612126943
655	0.7664330856834376	0.0235351087071129	0.1424180139521488
656	0.0438830135757465	0.6052751750431014	0.1320036370391774
657	0.2040297589306597	0.6838530449016661	0.1172055998820768
658	0.7662067365340063	0.6840060412856593	0.1174505221763762
659	0.9264032373637737	0.6053305846947600	0.1320661086442916
660	0.2641065850400507	0.7742819515061160	0.1176932632551749
661	0.4263039865436568	0.8621457279005431	0.1216193283521641
662	0.5439318793216215	0.8623056226786587	0.1213231402597078
663	0.7061812958166814	0.7744588440255320	0.1176724239979114
664	0.2650324095975883	0.9332729367524172	0.1364263580821637
665	0.7051582576849821	0.9336379487485895	0.1358691125036808
666	0.1987975541724959	0.5196827828235234	0.1251284116227341
667	0.7713950116931395	0.5199103053958476	0.1255838240716727
668	0.0964639177015455	0.1866232564953751	0.1514633979258452
669	0.2634029629652220	0.1023240816316074	0.1435215840407196
670	0.7069607288528683	0.1027442413887154	0.1432706237556144
671	0.8739969723883052	0.1867824099978471	0.1521612470930493
672	0.2051935385117934	0.3518627075521513	0.1431191204848383

673	0.3748208146579158	0.2709811633968524	0.1437860149312868
674	0.5956127322832512	0.2711374968225259	0.1439711903786755
675	0.7651102926835556	0.3521886996708427	0.1437941828296860
676	0.3682986559944608	0.4329115654127846	0.1142265445773771
677	0.6019962878535839	0.4330804597143765	0.1145291528045833
678	0.0950539264514575	0.0190646118387137	0.1453100634019860
679	0.8751007420234158	0.0192933782882925	0.1448287490496267
680	0.0987532749650396	0.6881052119859544	0.1273702306788129
681	0.2597899956370314	0.5994088023478142	0.1091217807448055
682	0.7103324567451732	0.5996047865718944	0.1096718846350570
683	0.8715671740015905	0.6882101494617401	0.1274272706854611
684	0.2096115797371782	0.8514431428405792	0.1331227824799626
685	0.3739309808704619	0.7786039751715107	0.1016226167055634
686	0.5964151327779017	0.7786810268230204	0.1014682515785332
687	0.7605837369969169	0.8517599587133073	0.1329431178902075
688	0.3729988486422875	0.9410215049623715	0.1349137592382754
689	0.5971807526362541	0.9413434112048811	0.1341944576913948
690	0.0942416220007567	0.5200949529927088	0.1358945202882191
691	0.8760153915743530	0.5202136227658842	0.1361306294731538
692	0.4151882550273482	0.5666645551415751	0.0686741114277194
693	0.5551198626345588	0.5668247659383771	0.0689919613211734
694	0.4850979934093582	0.7361695411003442	0.0356788756936773
695			
696	Ru ₃ @C ₃ N ₃		
697	1.000000000000000		
698	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
699	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
700	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
701	C	N	Ru
702	24	24	3
703	Direct		
704	0.0488222052144507	0.1046148351304276	0.1399474038628465
705	0.2079171095120649	0.1844467306218691	0.1408435049657434
706	0.7641574594572599	0.1789996301105372	0.1360198269624086
707	0.9254346459356070	0.1023581012932546	0.1394898932757999
708	0.2678356735264301	0.2777134017625897	0.1399192868494973
709	0.4267213782845064	0.3623068792024651	0.1376050412815011
710	0.5469576335149393	0.3566950270578438	0.1278257899691167
711	0.7044938929728698	0.2708969211944902	0.1309967107648919
712	0.2611762517186100	0.4370440588695577	0.1404458721521192

713	0.7132095604772897	0.4261723882017128	0.1086455391498292
714	0.2080547003537309	0.0252123469580067	0.1394991400428544
715	0.7684274495812817	0.0199357787292774	0.1412901826208250
716	0.0408427203829083	0.6048805493643485	0.1224864526697881
717	0.1977208189216284	0.6874135511335603	0.1279610075854058
718	0.7608276042376998	0.6805441274395869	0.1083291805941173
719	0.9230686541091536	0.6030530493962442	0.1166188779337114
720	0.2607149760912251	0.7736238207730014	0.1281971394152275
721	0.4263544245889729	0.8522527318964116	0.1388958671033089
722	0.5459755200912498	0.8562166672509179	0.1347105164840686
723	0.7031926188593470	0.7711638963448725	0.1129023593316446
724	0.2664184969631354	0.9333975653727246	0.1385784411000831
725	0.7082059323560356	0.9280384357421525	0.1406548650439750
726	0.1967815368124486	0.5235127083475549	0.1370028866360747
727	0.7714538819107682	0.5163704076927694	0.1055708899491986
728	0.0986355799923809	0.1887954179632645	0.1413001774730266
729	0.2671286053523153	0.1052556580142612	0.1405419431535864
730	0.7072359578261345	0.0984823281165860	0.1388001482376316
731	0.8734287761113977	0.1848186709303920	0.1361301813342893
732	0.2077352182948262	0.3560587342134070	0.1383726758609797
733	0.3769734857379818	0.2789932720516150	0.1378484622757027
734	0.5961643878836043	0.2752204077611025	0.1404827395977451
735	0.7662787534484113	0.3475629011232396	0.1194759955543079
736	0.3731530459338258	0.4482799571886011	0.1429165820467818
737	0.6015716293682051	0.4343503733747200	0.1039961325836865
738	0.0989428262640970	0.0212970399651070	0.1385579065063523
739	0.8774755605272124	0.0174657499825555	0.1419474823696385
740	0.0919377833088111	0.6886703114148098	0.1192755204443517
741	0.2563322121897164	0.6053252014769894	0.1398065117969170
742	0.7065083157320786	0.5956586852373343	0.0986750715486662
743	0.8674272970636876	0.6843349412052802	0.1168732730717541
744	0.2083085780178075	0.8546464326534932	0.1307827017646422
745	0.3754219861703949	0.7627841945201502	0.1292746931035594
746	0.5924963906855959	0.7793229186079539	0.1031152560063320
747	0.7609350374238725	0.8483174820351934	0.1277586524693818
748	0.3756681780638014	0.9332010368902265	0.1443283062559902
749	0.5998289165619755	0.9314370635182837	0.1532359213142106
750	0.0910312502125457	0.5207229793753660	0.1296563189351277
751	0.8767946671200384	0.5168938422649894	0.1127453335715282
752	0.4144882230547794	0.6042861986842563	0.1414637236091886

753	0.5548637097050104	0.5643485979196118	0.0743360947389089
754	0.4807684460758756	0.7159458956250095	0.0529654796316749
755			
756	Rh ₃ @C ₃ N ₃		
757	1.000000000000000		
758	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
759	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
760	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
761	C	N	Rh
762	24	24	3
763	Direct		
764	0.0465534859295904	0.1087779053203065	0.1208401884395042
765	0.2045989991473404	0.1897781175315787	0.1184568589755315
766	0.7625222941201805	0.1780848466094450	0.1233726438594344
767	0.9240651213295856	0.1037542889241459	0.1204536903861674
768	0.2679209602790402	0.2799544400514477	0.1164683498523782
769	0.4272254229133538	0.3564484730900528	0.1388534592896737
770	0.5470743686255093	0.3536711690150043	0.1414654391352510
771	0.7031207758782051	0.2690418727056111	0.1267497705108724
772	0.2673612110509476	0.4378778276463684	0.1182474354473474
773	0.7174698555318055	0.4262403175730245	0.1376450759346112
774	0.2055725930582439	0.0324791430314301	0.1304161021888289
775	0.7684877272574124	0.0193563542334824	0.1221975466216985
776	0.0482811312334596	0.6090857131412928	0.1206291021693495
777	0.2056295362050929	0.6925365262599807	0.1279573447971490
778	0.7632143635452019	0.6780402776784664	0.1287610488768302
779	0.9287608093459130	0.6044249918047639	0.1214199325878155
780	0.2605986242055753	0.7833858256356905	0.1294102561197921
781	0.4243393649267552	0.8657541564755963	0.1265739164777073
782	0.5426358997033680	0.8577785085168170	0.1244292376420560
783	0.6981997795162187	0.7668815221656189	0.1234272348558494
784	0.2655277966636467	0.9425206923629859	0.1333479349010681
785	0.7069166644613265	0.9284433668672757	0.1238337083665150
786	0.2100183073622916	0.5300469316778691	0.1168316030374556
787	0.7781593594852845	0.5159535846018348	0.1349998680243148
788	0.0954267090684968	0.1929887291053117	0.1138553912047963
789	0.2638343471306261	0.1116965784851482	0.1268438898894649
790	0.7065826261044958	0.0975249539953100	0.1236638944930064
791	0.8714793265669273	0.1855573665364293	0.1221958547846215
792	0.2138763297088301	0.3604470520953331	0.1023582703371770

793	0.3740708435576670	0.2753778240008211	0.1298552699600624
794	0.5946946830652884	0.2709278612371688	0.1306053884940620
795	0.7666668676816006	0.3467482162544654	0.1253662942385718
796	0.3712384197544753	0.4399572315562099	0.1430738217790687
797	0.6077524192007270	0.4343893574883254	0.1523797507334598
798	0.0970031019487438	0.0266441401435426	0.1291750578209319
799	0.8775739461928830	0.0179313057661161	0.1199632615498193
800	0.0979466262874771	0.6924357994479073	0.1281196703180834
801	0.2728601250892468	0.6125816999827692	0.1232662925570182
802	0.7137551689550840	0.5942974287250009	0.1441250581775143
803	0.8695487412431869	0.6845319477576316	0.1186854894317919
804	0.2062614336757439	0.8631683059335470	0.1354811231190844
805	0.3713042482603749	0.7820500426695689	0.1219750025366079
806	0.5847347616465626	0.7666893607409569	0.1190022032293240
807	0.7578775684487645	0.8449282003862217	0.1242462907413350
808	0.3747875497399508	0.9474639063960822	0.1313088340274850
809	0.5984866674813542	0.9362925221790086	0.1270922449881941
810	0.1035385472715138	0.5267134896421589	0.1146817479911029
811	0.8831673426775176	0.5173346694040812	0.1242505993800142
812	0.3697230193761168	0.5516028638594764	0.2046193690541673
813	0.5647997839566639	0.5612427392468816	0.1771470570511142
814	0.4577043011343275	0.6694494720444192	0.1189751296149282
815			
816	Pd ₃ @C ₃ N ₃		
817	1.0000000000000000		
818	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
819	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
820	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
821	C	N	Pd
822	24	24	3
823	Direct		
824	0.0461699342662326	0.1057929380148903	0.1205252398724500
825	0.2050562596123818	0.1844127166556633	0.1184305454107528
826	0.7651732307171250	0.1838065025889372	0.1206166228254528
827	0.9240959674607510	0.1054555786777142	0.1209855785718527
828	0.2659337811646340	0.2753637332619263	0.1184285264342992
829	0.4246368268627043	0.3545034450780915	0.1294685028241066
830	0.5459564880776041	0.3544120307323802	0.1297415722299477
831	0.7045127354076737	0.2747488878151995	0.1208132742860812
832	0.2628613034582833	0.4336776170750831	0.1203197007993745

833	0.7079795050662053	0.4331038075602003	0.1210342625231554
834	0.2040369681139892	0.0262197918729954	0.1233339139193693
835	0.7665145211427266	0.0255054490117833	0.1246913643980595
836	0.0449321698330081	0.6076086207613556	0.1182736869085481
837	0.2035085015682501	0.6860082866685165	0.1326089168312614
838	0.7666980190534771	0.6854340520922342	0.1338517555513746
839	0.9254133389225619	0.6075620223451942	0.1180043799265307
840	0.2642815721940193	0.7759147646820653	0.1332215846397237
841	0.4253778912737924	0.8608716663588618	0.1289784026409636
842	0.5446725082835863	0.8604608581761557	0.1290150728074572
843	0.7053807656389386	0.7751044407250721	0.1337917331661121
844	0.2645306831206971	0.9358375593937417	0.1264140256528133
845	0.7059105924545017	0.9351393798632806	0.1277562010002711
846	0.2015482286601714	0.5249019396502393	0.1208020577552172
847	0.7694713368440385	0.5242949680547141	0.1217837429401692
848	0.0960394627528092	0.1893956316061146	0.1177337377721566
849	0.2635768534581085	0.1051838378394519	0.1208848102471866
850	0.7068429679966654	0.1044898157359346	0.1231972631784168
851	0.8740931727702949	0.1889712985858460	0.1192547795942113
852	0.2069844049581693	0.3547716850661544	0.1125579643011995
853	0.3743754445122031	0.2717971929373366	0.1251055132562056
854	0.5961454299278572	0.2714662822684707	0.1275745863662974
855	0.7638877841591423	0.3540358174990491	0.1148887439596515
856	0.3721491842172239	0.4387901514694626	0.1309262152230823
857	0.5982232545639889	0.4387759309624822	0.1295091065519784
858	0.0952306266219890	0.0219011577720313	0.1236924428690872
859	0.8753509246260539	0.0213480856312522	0.1237956074663271
860	0.0962124223181407	0.6902763333586082	0.1272744167694867
861	0.2612373616566543	0.6039997199433750	0.1345455225037016
862	0.7106498918111286	0.6027756810347260	0.1381401005206297
863	0.8737367443919891	0.6899675786033674	0.1268520587180471
864	0.2076247762924387	0.8551887301945174	0.1306542517214563
865	0.3756051896567564	0.7744899378038693	0.1342991083482031
866	0.5938838157732693	0.7735837180820009	0.1330137106382851
867	0.7623257442432487	0.8542883425905535	0.1322137490595797
868	0.3733725538205880	0.9414687462316207	0.1242755388897654
869	0.5970639605559083	0.9410115557925194	0.1256942510353955
870	0.0958151619966712	0.5234127235770488	0.1106867044282505
871	0.8745604070950013	0.5234342084433368	0.1095685812716123
872	0.3736428271523198	0.5492878637449418	0.2090282497868382

873	0.5935496623370610	0.5489335406113930	0.2078934043174402
874	0.4841167981369656	0.6721032934982200	0.1529489232901725
875			
876	Hf ₃ @C ₃ N ₃		
877	1.0000000000000000		
878	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
879	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
880	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
881	C	N	Hf
882	24	24	3
883	Direct		
884	0.0467959579888270	0.1045394283666695	0.1184378403895711
885	0.2061847007743600	0.1831985823081058	0.1165542984971231
886	0.7646113215785622	0.1832101476365304	0.1179096229324979
887	0.9239941364577349	0.1045267272085015	0.1188232780657178
888	0.2664630458151492	0.2736784283015365	0.1173884359437905
889	0.4257713229735542	0.3527826973274059	0.1345839790964024
890	0.5444720052088138	0.3528302412686626	0.1349017298829507
891	0.7041094188836713	0.2736505585616112	0.1186532889870690
892	0.2583274477585327	0.4317288896430148	0.1262448938885008
893	0.7117840252700919	0.4317633441126559	0.1268993691655376
894	0.2050660342144939	0.0248769179878847	0.1209613949055649
895	0.7658268782627058	0.0247775946595640	0.1220833529136113
896	0.0441182172099547	0.6056221426845571	0.1150612324474887
897	0.2035215803311154	0.6850669461334600	0.1304121065201446
898	0.7666982608249702	0.6848449960362796	0.1318126434941435
899	0.9259672357738337	0.6056146382649544	0.1153918777254781
900	0.2644728736622802	0.7749065660217711	0.1323267470722411
901	0.4275247758534695	0.8604734409394403	0.1388447347919903
902	0.5430737513086876	0.8605675454611430	0.1391307987909487
903	0.7061271573691982	0.7747781912717551	0.1337352569302437
904	0.2671967641579601	0.9350197536053881	0.1252829847393825
905	0.7037359054334573	0.9349118620246016	0.1264299160793990
906	0.1994590693934390	0.5207035353599707	0.1243432395124149
907	0.7707919925429750	0.5207340469775229	0.1251498429529504
908	0.0967864355437550	0.1879606818709651	0.1163382369877643
909	0.2644490380448944	0.1038749028588152	0.1187099491354890
910	0.7064397915630635	0.1038355291260588	0.1203919166744047
911	0.8739874943691452	0.1879841348013029	0.1171869833068245
912	0.2069409691041532	0.3529015110795967	0.1130886891268294

913	0.3754747841352222	0.2724204698951015	0.1219638809878488
914	0.5951068112882850	0.2723628349603242	0.1229366186103486
915	0.7634652063659049	0.3530005742306208	0.1141408304010269
916	0.3676492775562328	0.4354852586303984	0.1489391020977959
917	0.6022940133578473	0.4357821429109662	0.1489362605676244
918	0.0961845839186143	0.0203842596929198	0.1209322079803329
919	0.8747169036853811	0.0203374141865245	0.1213245340575297
920	0.0987705768313244	0.6890003840679069	0.1186908064815413
921	0.2596829146310939	0.6016309083719253	0.1423663883007699
922	0.7105141331575167	0.6013298718348923	0.1435094213808417
923	0.8714038960311338	0.6888416583078397	0.1196947082968145
924	0.2107678755096437	0.8523946087632784	0.1192499932409633
925	0.3737215379947382	0.7733068552424804	0.1491918093987196
926	0.5966524849267152	0.7734769785156937	0.1501452840840522
927	0.7601249656317556	0.8522390468123830	0.1209892227450892
928	0.3729418439948847	0.9423024404227182	0.1340002255293928
929	0.5977281159631213	0.9422973766850091	0.1343454002914474
930	0.0942365880003760	0.5212024707840411	0.1125905576912897
931	0.8758096539660652	0.5211278262115892	0.1130773508907317
932	0.3685600813905872	0.5493182926786344	0.2143209558611978
933	0.5986590262872419	0.5497031547627317	0.2145366867023067
934	0.4847270677034639	0.7288011661322764	0.2210690984458596
935			
936	Ta ₃ @C ₃ N ₃		
937	1.0000000000000000		
938	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
939	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
940	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
941	C	N	Ta
942	24	24	3
943	Direct		
944	0.0467054392222422	0.1052768163771324	0.1183603175799634
945	0.2066523424637146	0.1831113335239820	0.1159254896862714
946	0.7639597949137009	0.1829324189918263	0.1165171680448533
947	0.9239041957201747	0.1051600304806088	0.1185842856514186
948	0.2668847175064844	0.2742653751049312	0.1163170066061973
949	0.4254599381259449	0.3554537141200749	0.1329707890203002
950	0.5451472847213705	0.3553377830140981	0.1333190965126297
951	0.7037550256729618	0.2740791819805302	0.1169450506223585
952	0.2576537637159914	0.4321757889770224	0.1252242601764253

953	0.7128312400809819	0.4318227405318782	0.1262731003904692
954	0.2042148510699504	0.0243902380933393	0.1194218329162682
955	0.7663708097651487	0.0242395311597453	0.1204843286465183
956	0.0444937293839558	0.6073921972477642	0.1178734871595202
957	0.2053035260555165	0.6845189362506531	0.1362630078010599
958	0.7647148810055795	0.6841919681305276	0.1369084015950209
959	0.9255464530716340	0.6072872054711841	0.1181671097472501
960	0.2657312434120783	0.7744186381979945	0.1381938846870871
961	0.4264569845245368	0.8617980828822347	0.1354512213491449
962	0.5436415645084891	0.8617082226226508	0.1356424279934768
963	0.7043534933890633	0.7741002500170684	0.1387647060878764
964	0.2651189996195061	0.9341583502899983	0.1232056126224476
965	0.7053223137670260	0.9339733458343630	0.1242329172571842
966	0.1982210955885789	0.5209722687242985	0.1256804615832271
967	0.7720615870125838	0.5207315003056715	0.1266096392144293
968	0.0972894842310985	0.1885372188321627	0.1166394846203055
969	0.2643269351398986	0.1033941858846285	0.1172125368447471
970	0.7062593022375853	0.1032422419157158	0.1183132014455546
971	0.8732793767918995	0.1883830976516847	0.1166257867133266
972	0.2066808974231540	0.3530685760385796	0.1121987343305962
973	0.3759710668130822	0.2744922634868778	0.1207765421497955
974	0.5946487577348361	0.2743856582442139	0.1210204574848878
975	0.7640002669677352	0.3528859495916251	0.1130665395566814
976	0.3669456304407217	0.4378888640913789	0.1460847025501506
977	0.6036569266796968	0.4375652587151796	0.1470319183724955
978	0.0953358174295690	0.0208779623560747	0.1200329535855584
979	0.8752824880225778	0.0207631074855200	0.1208708608450208
980	0.1001077618212757	0.6891828510099086	0.1239444063212058
981	0.2592743121890426	0.5993203364020582	0.1469568260062358
982	0.7108614283923783	0.5989771591098236	0.1478563886991124
983	0.8697970611261336	0.6889691638452810	0.1242592567548243
984	0.2103821287432121	0.8516605904691682	0.1248802449906818
985	0.3766685537067436	0.7760845441911659	0.1533390672866237
986	0.5931422256183790	0.7756362304620390	0.1531592827025949
987	0.7599316678122430	0.8514150817559507	0.1260011485484086
988	0.3733452092615918	0.9406346367281123	0.1236357919819980
989	0.5970954417158478	0.9405502846134648	0.1244360625725074
990	0.0937036786818863	0.5225403494996812	0.1129516834482375
991	0.8764540174048974	0.5223568200840514	0.1136225581655232
992	0.3816410276794205	0.5517548635484237	0.2117990282285494

993	0.5880952711606441	0.5519313465629807	0.2127810586743292
994	0.4852079404572315	0.7081154150946568	0.2171978591686482
995			
996	W ₃ @C ₃ N ₃		
997	1.000000000000000		
998	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
999	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
1000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
1001	C	N	W
1002	24	24	3
1003	Direct		
1004	0.0465376549738983	0.1054650451109587	0.1180599461118350
1005	0.2061171054274561	0.1839373393400408	0.1169299248589968
1006	0.7635967306754734	0.1821214432884636	0.1167318627969645
1007	0.9238452547491212	0.1047618488717145	0.1180076828979738
1008	0.2664061427509909	0.2752374932800389	0.1173168479270151
1009	0.4256888870694591	0.3561860070487052	0.1310170835436016
1010	0.5452300041495914	0.3551300010433568	0.1331091013173878
1011	0.7037255786058195	0.2731898719167519	0.1175102024941471
1012	0.2586516639741949	0.4335291514283322	0.1229667404799203
1013	0.7138475436338932	0.4309731425514626	0.1269599287823674
1014	0.2044241635732148	0.0253183483092225	0.1189026665136210
1015	0.7666803803793829	0.0233900958419103	0.1192584603824804
1016	0.0440740794012292	0.6080034471708706	0.1167596565782855
1017	0.2043664782707119	0.6856346282074297	0.1341833643066958
1018	0.7641855820297216	0.6835185189586092	0.1371901791627061
1019	0.9251741195475643	0.6073183995398853	0.1173329847099004
1020	0.2645431724561447	0.7752633379865176	0.1357615214492925
1021	0.4263184793315497	0.8619792850692861	0.1325755261522702
1022	0.5440389460739445	0.8611415050912673	0.1334023900985398
1023	0.7037078934881063	0.7732923000036210	0.1387435598713398
1024	0.2650860945967389	0.9350948156286575	0.1217909842691583
1025	0.7059171624817909	0.9329156834951845	0.1223793821631960
1026	0.1984895966644625	0.5225666589254907	0.1240552771297680
1027	0.7728286431915087	0.5198596975407823	0.1270328573933723
1028	0.0968055084119124	0.1889923888882954	0.1172467531650605
1029	0.2642596419671949	0.1044613321008655	0.1179009352750065
1030	0.7061837949516793	0.1021805102773034	0.1181617981974573
1031	0.8729257553582614	0.1877690506888390	0.1167992185619537
1032	0.2062517982076802	0.3539262161429787	0.1128169413945560

1033	0.3753839073987761	0.2744874792388825	0.1226562859106530
1034	0.5946573217116097	0.2742508804842617	0.1214375301227278
1035	0.7640451222383023	0.3520206722392565	0.1130200628391336
1036	0.3691035390914069	0.4406112702581622	0.1383661114465318
1037	0.6046213584916041	0.4370848146595896	0.1478584224628606
1038	0.0955852343303018	0.0213214214945254	0.1189348965732461
1039	0.8755581553009485	0.0200903467167773	0.1192488032920658
1040	0.0987273645714657	0.6900521289804157	0.1232281888204705
1041	0.2593474095860139	0.6008276194934244	0.1436512760750936
1042	0.7116990900819713	0.5976046184653605	0.1490543774277718
1043	0.8688769339098744	0.6884692599859950	0.1239036079194259
1044	0.2096970487708203	0.8532081041442202	0.1243483231177210
1045	0.3762574948196949	0.7762240132240428	0.1491242000491964
1046	0.5924478886827309	0.7757473717522817	0.1527239637823629
1047	0.7598239515059966	0.8504725284161189	0.1259488223303854
1048	0.3736440418476797	0.9407701091057755	0.1205352763707464
1049	0.5975451912460046	0.9390700241747233	0.1202262429333031
1050	0.0939188099634141	0.5234969909363087	0.1110198952933775
1051	0.8765123064667558	0.5223069200016143	0.1125092017249122
1052	0.3887175143164162	0.5538306071416448	0.2056236887389195
1053	0.5850278766558774	0.5519297993862600	0.2095299013797993
1054	0.4793944866196334	0.7017653729535057	0.2102071554044160
1055			
1056	Re ₃ @C ₃ N ₃		
1057	1.0000000000000000		
1058	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
1059	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
1060	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
1061	C	N	Re
1062	24	24	3
1063	Direct		
1064	0.0473905637793764	0.1039149885926899	0.1186766113624788
1065	0.2098220223483179	0.1771807891324810	0.1161820316286304
1066	0.7672096441006323	0.1933237431695055	0.1186744604262232
1067	0.9245408877239774	0.1105643675951981	0.1188869934890190
1068	0.2692266227910959	0.2684587016502668	0.1179699501221072
1069	0.4236649843939055	0.3521922312519415	0.1412378447232899
1070	0.5421642596907209	0.3538550888292410	0.1458829355382073
1071	0.7045477451802278	0.2822339307111996	0.1216715582930448
1072	0.2517206929892736	0.4251966653274077	0.1301924868465582

1073	0.7048742523237622	0.4404648911234919	0.1352598942581063
1074	0.2027424738366475	0.0185931816460706	0.1205876611979861
1075	0.7640588850887642	0.0351403234638096	0.1202998680221607
1076	0.0406997043250297	0.6048193734972709	0.1157289999236362
1077	0.2053161439636698	0.6782213234843611	0.1296563181814822
1078	0.7677604389417607	0.6971309123844057	0.1205735935260051
1079	0.9225627055693946	0.6105376472788054	0.1163312688396873
1080	0.2730803204664177	0.7653446378604376	0.1277089691226549
1081	0.4289513053349248	0.8553522556590790	0.1255209992705012
1082	0.5463544561108816	0.8651066253527206	0.1247435752716392
1083	0.7130985607880842	0.7870996813999491	0.1216334399690107
1084	0.2646804875687791	0.9270305827665462	0.1230626813958554
1085	0.7041407799528654	0.9455468191619050	0.1203840430284729
1086	0.1906413838872746	0.5147833961857606	0.1299334174496798
1087	0.7576587425132589	0.5338635709213395	0.1263472761359132
1088	0.1010368353691365	0.1851157343437953	0.1158320888897091
1089	0.2652180383827657	0.0963407920714544	0.1180719880736919
1090	0.7068344963825410	0.1147271815528669	0.1202846750362429
1091	0.8770305129702960	0.1959022147286476	0.1172865005349046
1092	0.2053716541064265	0.3459994077870558	0.1132297150054663
1093	0.3766491222535990	0.2701545637141876	0.1260118730074951
1094	0.5964410339406583	0.2778422572311539	0.1274980745695770
1095	0.7566306758196579	0.3659120584458579	0.1146665681630290
1096	0.3586695125286123	0.4316304872992205	0.1527495076963452
1097	0.6037815960487215	0.4329401030720991	0.1691667551472859
1098	0.0935542601571463	0.0178013304140291	0.1215221787443131
1099	0.8728909337887075	0.0283009274083833	0.1206620192831894
1100	0.1013454460677315	0.6849945921252975	0.1149575368070100
1101	0.2523093656768161	0.5937941537014917	0.1483600990552491
1102	0.6967625120351844	0.6190425083147068	0.1254748054121953
1103	0.8743061317660195	0.6956124587044628	0.1173183524461840
1104	0.2137801885783439	0.8435881612827084	0.1248837642768867
1105	0.3877907890776739	0.7634130128024218	0.1292432048460013
1106	0.6009814187367792	0.7809134097867495	0.1279195707090268
1107	0.7651953897303473	0.8669569169260833	0.1176006256302507
1108	0.3728482498607271	0.9343233793534168	0.1233281870111750
1109	0.5949430155827742	0.9474457084529947	0.1219882874808721
1110	0.0875395154590943	0.5175777064694950	0.1150742491504915
1111	0.8637662967280759	0.5296429065886161	0.1209007580200229
1112	0.3930944836751030	0.5536652241935776	0.1982559234237374

1113	0.5653199136232214	0.5417962249995105	0.2234790123061551
1114	0.5295004519847977	0.6574107667838232	0.1411467922511359
1115			
1116	Os ₃ @C ₃ N ₃		
1117	1.0000000000000000		
1118	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
1119	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
1120	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
1121	C	N	Os
1122	24	24	3
1123	Direct		
1124	0.0463099979999981	0.1048100009999970	0.1181299920000001
1125	0.2045699970000001	0.1838299870000029	0.1205600019999977
1126	0.7656799969999994	0.1837099999999978	0.1224299909999971
1127	0.9239699829999992	0.1046700050000027	0.1207000019999995
1128	0.2657200189999998	0.2754899879999968	0.1227599979999994
1129	0.4239700219999989	0.3546199950000002	0.1247799989999976
1130	0.5463000120000032	0.3546100109999983	0.1251100059999999
1131	0.7045699580000004	0.2754600040000028	0.1241999980000017
1132	0.2656799780000014	0.4336599980000031	0.1264999990000035
1133	0.7045599759999988	0.4336299799999992	0.1274899960000013
1134	0.2045799970000033	0.0256400000000028	0.1172899959999967
1135	0.7657100189999966	0.0255600010000023	0.1186900020000010
1136	0.0463099979999981	0.6045699929999984	0.1291099910000000
1137	0.2045699970000001	0.6835800120000002	0.1315400000000011
1138	0.7656799969999994	0.6834800419999993	0.1334200020000011
1139	0.9239699829999992	0.6044300220000025	0.1316800000000029
1140	0.2657200189999998	0.7752599470000021	0.1337399960000027
1141	0.4239700219999989	0.8543799859999979	0.1357599970000010
1142	0.5463000120000032	0.8543700029999997	0.1360999939999985
1143	0.7045699580000004	0.7752199460000000	0.1351899980000013
1144	0.2656799780000014	0.9334200229999965	0.1374800090000008
1145	0.7045599759999988	0.9333999890000015	0.1384699939999976
1146	0.2045799970000033	0.5253999689999986	0.1282700060000010
1147	0.7657100189999966	0.5253199989999970	0.1296699999999973
1148	0.0959599990000015	0.1885299979999999	0.1200399989999994
1149	0.2635200060000003	0.1047199980000002	0.1193500039999975
1150	0.7067500080000002	0.1046300029999969	0.1206200000000024
1151	0.8742899849999972	0.1883800089999994	0.1226700070000035
1152	0.2067500080000002	0.3545599930000023	0.1246900080000017

1153	0.3743200059999978	0.2708899980000012	0.1225999950000016
1154	0.5959699900000004	0.2708800139999994	0.1235700009999974
1155	0.7635199870000022	0.3545300079999976	0.1262200000000036
1156	0.3742899849999972	0.4383100069999983	0.1267500040000016
1157	0.5959600090000023	0.4383200239999994	0.1270099999999985
1158	0.0959800010000009	0.0210700000000017	0.1166000010000019
1159	0.8743100249999998	0.0209499999999991	0.1185199979999965
1160	0.0959599900000015	0.6882899889999976	0.1310199979999993
1161	0.2635200060000003	0.6044800069999994	0.1303299899999999
1162	0.7067500080000002	0.6043900199999968	0.1316000099999997
1163	0.8742899849999972	0.6881399680000015	0.1336500049999998
1164	0.2067500080000002	0.8543300010000010	0.1356700059999980
1165	0.3743200059999978	0.7706500059999968	0.1335799929999979
1166	0.5959699900000004	0.7706500059999968	0.1345499990000008
1167	0.7635199870000022	0.8542899999999989	0.1371999979999998
1168	0.3742899849999972	0.9380700319999988	0.1377300019999979
1169	0.5959600090000023	0.9380899989999989	0.1379899980000019
1170	0.0959800010000009	0.5208299620000005	0.1275799989999982
1171	0.8743100249999998	0.5207099920000005	0.1295000080000008
1172	0.4165099940000019	0.5716099990000032	0.1386499999999984
1173	0.5528299879999992	0.5715699980000011	0.1386499999999984
1174	0.4846799919999967	0.6784099850000018	0.1386499999999984
1175			
1176	Ir ₃ @C ₃ N ₃		
1177	1.0000000000000000		
1178	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
1179	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
1180	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
1181	C	N	Ir
1182	24	24	3
1183	Direct		
1184	0.0464869447487374	0.1018265705874293	0.1118697603776055
1185	0.2069237697548977	0.1784633791820220	0.1100155148866623
1186	0.7653926851301770	0.1830391987710007	0.1180611127144082
1187	0.9242156436601396	0.1038020366332762	0.1113734703668535
1188	0.2663787279744143	0.2700301490074803	0.1118350976024470
1189	0.4222072310130547	0.3517829418424577	0.1339290164150709
1190	0.5447302122499925	0.3559751774538665	0.1302002952710329
1191	0.7054421087546843	0.2742688775527560	0.1228751925425321
1192	0.2535334748790613	0.4246026919800542	0.1337046714789464

1193	0.7140762125423354	0.4324371140668336	0.1249700928893316
1194	0.2026810221835891	0.0199088361455019	0.1195200694906390
1195	0.7660831101245511	0.0250560849746398	0.1093812991611859
1196	0.0464329476477926	0.6082515413074049	0.1305563357116699
1197	0.2091438507674120	0.6804553396146692	0.1547429565541457
1198	0.7646320458091228	0.6868528480081612	0.1353684474499922
1199	0.9276745712977411	0.6095881364041379	0.1295794321994840
1200	0.2707135899192858	0.7724538904340570	0.1547885789132049
1201	0.4281515240491117	0.8643090342210611	0.1406108513128324
1202	0.5476602264324323	0.8663952158763558	0.1369818047094811
1203	0.7054197202143180	0.7792521014767139	0.1382432769786065
1204	0.2638406071898621	0.9299204087322164	0.1268891637151283
1205	0.7055558432892084	0.9352789816057716	0.1121121857319830
1206	0.1946227046490274	0.5159170813730311	0.1388323224143203
1207	0.7739606374568042	0.5227061197203929	0.1261293834541634
1208	0.0979578183895788	0.1841886314289628	0.1064384538749663
1209	0.2636505797528294	0.0985622562904279	0.1159640638129185
1210	0.7067514163691960	0.1039425690038997	0.1149542008413027
1211	0.8747790108979452	0.1872715926435860	0.1175445655176979
1212	0.2042798429034524	0.3486315988041382	0.1118190426745176
1213	0.3752781403475154	0.2716215142822300	0.1150363199627243
1214	0.5963164386859521	0.2739200179610581	0.1275666313801750
1215	0.7670958668573112	0.3525606408822206	0.1228195989398220
1216	0.3596070999827514	0.4262914930436122	0.1560474097450443
1217	0.6015474646054613	0.4406818770311640	0.1270867266114844
1218	0.0938088173278106	0.0172658918362000	0.1189426778520696
1219	0.8746065500915908	0.0203597443597315	0.1060514920320917
1220	0.1045995704561704	0.6872753170763408	0.1403038558758925
1221	0.2542411269629039	0.5909478283903717	0.1658457306773215
1222	0.7088280600643629	0.6024253280006410	0.1289112711508017
1223	0.8719731964482222	0.6912746342954856	0.1358490637704106
1224	0.2130130247134508	0.8479333422176176	0.1381540541637234
1225	0.3821425264162360	0.7830565683600464	0.1679160974428486
1226	0.6002003811316000	0.7881838086866582	0.1614843689437634
1227	0.7598554676430261	0.8535986661172663	0.1162340827796726
1228	0.3725152874764446	0.9372872468141935	0.1205568989710546
1229	0.5965260162283318	0.9411604974239859	0.1128009541553995
1230	0.0930787141807198	0.5222670250525376	0.1214255514017759
1231	0.8799741605446006	0.5237244921199073	0.1258259496805754
1232	0.3902113266281098	0.5523021140033458	0.2051753461377191

1233	0.5521809812388576	0.5721416580877339	0.1396972746105375
1234	0.4869515839178125	0.7006198078153281	0.2092679776519580
1235			
1236	Pt ₃ @C ₃ N ₃		
1237	1.00000000000000		
1238	12.3253002167000005	0.0000000000000000	0.0000000000000000
1239	0.0000000000000000	14.2330999374000005	0.0000000000000000
1240	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
1241	C	N	Pt
1242	24	24	3
1243	Direct		
1244	0.0459860715822589	0.1064555409258732	0.1229170404448367
1245	0.2034822267418879	0.1882912390892241	0.1219529548399041
1246	0.7635106585154994	0.1788150887159915	0.1283729115668341
1247	0.9239575978227045	0.1027336705299577	0.1263344822014267
1248	0.2639279609774541	0.2790822716169273	0.1235973034361178
1249	0.4252707093719543	0.3561625645183563	0.1336717929290078
1250	0.5462471332973164	0.3532745196953453	0.1320276064783331
1251	0.7034954824816742	0.2700138411576857	0.1279630714434828
1252	0.2626933547482327	0.4382337335303407	0.1240687370748988
1253	0.7119799619001375	0.4280666961301828	0.1230171752992933
1254	0.2051486613570571	0.0300594285192946	0.1172164054223310
1255	0.7683044653918131	0.0204127917614635	0.1349575670065430
1256	0.0444833769720055	0.6099578363929736	0.1155121346781843
1257	0.2023048948441624	0.6893688562456480	0.1199941253279994
1258	0.7641566449364385	0.6799551710741559	0.1437411469089943
1259	0.9238964713824610	0.6080784772145321	0.1162998516512837
1260	0.2625451792110688	0.7800346722913735	0.1236122075518856
1261	0.4237347994702826	0.8629996227891950	0.1304258119059126
1262	0.5430638725258328	0.8591454402884809	0.1357253392271280
1263	0.7000692697059430	0.7683716826337493	0.1457130486077867
1264	0.2658252191868574	0.9396226473688376	0.1171240815877982
1265	0.7065287085687306	0.9296187319590329	0.1376497589724830
1266	0.2030452689656169	0.5293770437525295	0.1181030060672623
1267	0.7749872241591411	0.5184707517441062	0.1251296323900393
1268	0.0941792198585374	0.1909219356353968	0.1252263363235550
1269	0.2633111317746583	0.1093905553155204	0.1185959298150898
1270	0.7071259591997990	0.0987797874067444	0.1343827914014410
1271	0.8719569386039402	0.1849063231391490	0.1228935181981594
1272	0.2065927531262401	0.3593762906709703	0.1178541289188213

1273	0.3729894723779527	0.2752473056803179	0.1282889344878513
1274	0.5953189371740802	0.2696871947935847	0.1353014554694232
1275	0.7657139713202565	0.3480577503009002	0.1214531915573731
1276	0.3729991173859732	0.4427231238334937	0.1372605480287368
1277	0.6013155023746773	0.4367611832876419	0.1259629096942427
1278	0.0966377422474070	0.0235035933820480	0.1182803504842793
1279	0.8771417016698232	0.0177292348721447	0.1325603230405452
1280	0.0940078851266412	0.6941301588546261	0.1190358169352315
1281	0.2616641004014455	0.6100446972207194	0.1188854682395228
1282	0.7199445064568110	0.5923403211693620	0.1538063947612742
1283	0.8701217789397245	0.6870433560142740	0.1299251963367494
1284	0.2082676005622912	0.8593968112765130	0.1146058449174436
1285	0.3715802846733007	0.7781417526751718	0.1366330566952321
1286	0.5867911301573652	0.7708221243548191	0.1445508339853307
1287	0.7585859850399398	0.8476529280983784	0.1441685159456832
1288	0.3744906938812596	0.9441150708666723	0.1210470828098730
1289	0.5979372874804472	0.9379983913542242	0.1312842105568386
1290	0.0947229469744526	0.5259603122157475	0.1152964390131914
1291	0.8755561492259705	0.5235858115290306	0.1038774780101107
1292	0.3903167191462755	0.5256985455114130	0.2231526660292264
1293	0.5891527166639628	0.5490889557248441	0.2034844682163865
1294	0.4714824560402369	0.6741640368710167	0.1661189231086121