

AM-96-606

Formation of regularly interstratified serpentine-chlorite minerals by  
tetrahedral inversion in long-period serpentine polytypes

Jillian F. Banfield, Sturges W. Bailey

For deposit: Table 1

American Mineralogist, 81, 1-2, 79-91.

Table 1: MSA deposit #.....  
Banfield and Bailey.

Atomic coordinates for ideal structures of serpentine-chlorite regular interstratifications. For each structure, the first two numbers in the file name (top right corner) indicate the period of the structure in Å. The sequence of letters 'S' and 'C' in the file names indicates the sequence of structural units in the phase.

282b90

a = 0.5334 [nm]  
b = 0.9228 [nm]  
c = 2.8148 [nm]  
alpha = 90.0000 [deg]  
beta = 90.0000 [deg]  
gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 1.3855 [nm3]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
+ (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 112

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm2]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.83330	0.50000	0.25000	0.50000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.83330	0.16670	0.25000	1.00000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.00000	0.00000	0.50000	0.50000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.00000	0.33330	0.50000	1.00000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.16670	0.50000	0.75000	0.50000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.16670	0.16670	0.75000	1.00000	1.00000	0.00600	12
O	0.33330	0.00000	0.03700	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.33330	0.03850	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.50000	0.11660	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.08330	0.25000	0.11660	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.00000	0.21490	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.33330	0.21490	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.66670	0.00000	0.28510	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.16670	0.16670	0.28510	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.83330	0.00000	0.38340	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.08330	0.25000	0.38340	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.00000	0.46300	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.83330	0.16670	0.46150	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.66670	0.00000	0.53510	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.66670	0.33330	0.53510	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.83330	0.00000	0.63340	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.08330	0.25000	0.63340	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.00000	0.71300	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.83330	0.16670	0.71150	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.00000	0.78510	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.33330	0.78510	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.16670	0.00000	0.88350	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.41670	0.25000	0.88350	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.66670	0.00000	0.96300	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.16670	0.16670	0.96150	1.00000	1.00000	0.00500	8
Si	0.33330	0.33330	0.09590	1.00000	1.00000	0.00600	14
Si	0.83330	0.16670	0.40410	1.00000	1.00000	0.00600	14
Si	0.83330	0.16670	0.65410	1.00000	1.00000	0.00600	14
Si	0.16670	0.16670	0.90420	1.00000	1.00000	0.00600	14

283uv1

a = 0.5334 [nm]  
b = 0.9228 [nm]  
c = 2.8148 [nm]  
alpha = 90.0000 [deg]  
beta = 90.0000 [deg]  
gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 1.3855 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
+ (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 112

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33333	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.00000	0.25000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.33333	0.25000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.00000	0.50000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.33333	0.50000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.66667	0.00000	0.75000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.75000	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.03700	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.33333	0.33333	0.03850	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33333	0.50000	0.11660	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.11660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.21490	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.21490	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.28700	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.28850	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.50000	0.00000	0.36660	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.25000	0.25000	0.36660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.46490	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.46490	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.53510	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.53510	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.50000	0.00000	0.63340	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.25000	0.25000	0.63340	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.71300	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.71150	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33333	0.00000	0.78510	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33333	0.33333	0.78510	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.88340	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.91670	0.25000	0.88340	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.96300	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.96150	1.00000	1.00000	0.00000	8
Si	0.33333	0.33333	0.09590	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.00000	0.33333	0.34590	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.00000	0.33333	0.65410	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.90410	1.00000	1.00000	0.00500	14

283uv2

a = 0.5334 [nm]  
b = 0.9228 [nm]  
c = 2.8148 [nm]  
alpha = 90.0000 [deg]  
beta = 90.0000 [deg]  
gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 1.3855 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
+ (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 112

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33330	0.00000	0.25000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33330	0.33330	0.25000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.66670	0.00000	0.50000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.66670	0.33330	0.50000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33330	0.00000	0.75000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33330	0.33330	0.75000	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.03700	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.03850	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.11660	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.11660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.21490	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.21490	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.28700	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.28850	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.36666	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.91670	0.25000	0.36660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.46490	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.46490	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.53510	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.53510	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.63340	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.91670	0.25000	0.63340	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.71300	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.71150	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.78510	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.78510	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.88340	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.91670	0.25000	0.88340	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.96300	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.96150	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.09590	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.66670	0.33330	0.34590	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.66670	0.33330	0.65410	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.90410	1.00000	1.00000	0.00500	14

28comp

a = 0.5334 [nm]  
b = 0.9228 [nm]  
c = 8.4444 [nm] -  
alpha = 90.0000 [deg]  
beta = 90.0000 [deg]  
gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 4.1565 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
+ (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 336

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33333	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.00000	0.08330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.33333	0.08330	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.00000	0.16660	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.33333	0.16660	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.66667	0.00000	0.25000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.25000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.33340	0.50000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.00000	0.33330	0.33340	1.00000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.00000	0.00000	0.41660	0.50000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.00000	0.33330	0.41660	1.00000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.83330	0.50000	0.49990	0.50000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.83330	0.16670	0.49990	1.00000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.16670	0.50000	0.58330	0.50000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.16670	0.16670	0.58330	1.00000	1.00000	0.00600	12
Mg	0.00000	0.00000	0.66660	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33333	0.66660	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.00000	0.75000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.33333	0.75000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.00000	0.83330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.33333	0.33333	0.83330	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.66667	0.00000	0.91660	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.91660	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.01230	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.33333	0.33333	0.01280	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33333	0.50000	0.03890	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.03890	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.07160	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.07160	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.09570	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.09620	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.50000	0.00000	0.12220	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.25000	0.25000	0.12220	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.15500	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.15500	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.17840	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.17840	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.50000	0.00000	0.21110	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.25000	0.25000	0.21110	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.23770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.23720	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33333	0.00000	0.26170	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33333	0.33333	0.26170	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.29450	0.50000	1.00000	0.00500	8

O	0.08330	0.25000	0.29450	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.00000	0.32100	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.83330	0.16670	0.32050	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.66670	0.00000	0.34500	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.66670	0.33330	0.34500	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.16670	0.00000	0.37780	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.91670	0.25000	0.37780	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.40430	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.40380	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33300	0.00000	0.42890	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.33330	0.42940	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.50000	0.45550	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.08330	0.25000	0.45550	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.00000	0.48820	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.33330	0.48820	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.66670	0.00000	0.51160	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.16670	0.16670	0.51160	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.83330	0.00000	0.54440	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.08330	0.25000	0.54440	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.00000	0.57090	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.83330	0.16670	0.57040	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.00000	0.59500	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.33330	0.59500	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.16670	0.00000	0.62780	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.41670	0.25000	0.62780	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.66670	0.00000	0.65430	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.16670	0.16670	0.65380	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33330	0.00000	0.67890	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.33333	0.33333	0.67940	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.33333	0.50000	0.70550	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.70550	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.73820	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.73820	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.76230	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.76280	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.50000	0.00000	0.78880	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.25000	0.25000	0.78880	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.82160	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.82160	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.84490	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.84490	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.50000	0.00000	0.87770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.25000	0.25000	0.87770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.90420	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33333	0.90370	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33333	0.00000	0.92830	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33333	0.33333	0.92830	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.96100	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.91670	0.25000	0.96100	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66667	0.00000	0.98760	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.98710	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33333	0.33333	0.03200	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.00000	0.33333	0.11530	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.00000	0.33333	0.21800	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.30140	1.00000	1.00000	0.00600	14
Si	0.16670	0.16670	0.38470	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.44860	1.00000	1.00000	0.00600	14
Si	0.83330	0.16670	0.55130	1.00000	1.00000	0.00600	14
Si	0.16670	0.16670	0.63470	1.00000	1.00000	0.00600	14
Si	0.33333	0.33333	0.69860	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.00000	0.33333	0.78190	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.00000	0.33333	0.88460	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.96790	1.00000	1.00000	0.00500	14

35scc

35ccsx.dat

a = 0.5334 [nm]  
 b = 0.9228 [nm]  
 c = 3.5185 [nm]  
 alpha = 90.0000 [deg]  
 beta = 90.0000 [deg]  
 gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 1.7319 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
 + (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 140

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.20000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.20000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.40000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.40000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.60000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.60000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.80000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.80000	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02960	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.03080	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.09330	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.09330	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.17190	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.17190	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.22810	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.22810	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.30670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.30670	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.37040	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.36920	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.43080	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.42960	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.49330	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.49330	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.00000	0.57190	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.57190	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.62810	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.62810	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.70680	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.70680	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.77040	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.76920	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.82810	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.82810	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.90670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.90670	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97040	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.96920	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.07670	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.32330	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.47670	1.00000	1.00000	0.00800	14
Si	0.83330	0.16670	0.72340	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.92330	1.00000	1.00000	0.00500	14



35sssc

a = 0.5334 [nm]  
b = 0.9228 [nm]  
c = 3.5185 [nm]  
alpha = 90.0000 [deg]  
beta = 90.0000 [deg]  
gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 1.7319 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
+ (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 140

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.20000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.20000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.40000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.40000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.60000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.60000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.80000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.80000	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02960	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.03080	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.09330	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.09330	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.17190	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.17190	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.22810	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.22810	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.30670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.30670	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.37040	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.36920	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.42810	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.42810	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.50670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.50670	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.57040	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.56920	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.62810	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.62810	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.70680	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.70680	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.77040	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.76920	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.82810	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.82810	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.90670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.90670	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97040	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.96920	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.07670	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.32330	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.52330	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.72340	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.92330	1.00000	1.00000	0.00500	14

42sscc

42ccss.dat

a = 0.5334 [nm]  
 b = 0.9218 [nm]  
 c = 4.2222 [nm]  
 alpha = 90.0000 [deg]  
 beta = 90.0000 [deg]  
 gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 2.0760 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
 + (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 168

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.16670	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.16670	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.33330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.33330	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.50000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.50000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.66670	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.66670	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.83330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.83330	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02470	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.02570	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.07770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.07770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.14330	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.14330	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.19010	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.19010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.25560	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.25560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.30870	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.30770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.35800	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.35900	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.41110	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.41110	1.00000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.00000	0.47660	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.47660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.52340	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.52340	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.58900	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.58900	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.64200	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.64100	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.69010	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.69010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.75560	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.75560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.80870	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.80770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.85670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.85670	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.92220	0.50000	1.00000	0.00800	8

O	0.41670	0.25000	0.92220	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97530	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.97430	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.06390	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.26940	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.39730	1.00000	1.00000	0.00800	14
Si	0.83330	0.16670	0.60280	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.76940	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.93600	1.00000	1.00000	0.00500	14

42ccss.dat Sorted (

42ssssc

42csss.dat

a = 0.5334 [nm]  
b = 0.9218 [nm]  
c = 4.2222 [nm]  
alpha = 90.0000 [deg]  
beta = 90.0000 [deg]  
gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 2.0760 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
+ (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 168

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.16670	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.16670	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.33330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.33330	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.50000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.50000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.66670	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.66670	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.83330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.83330	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02470	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.02570	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.07770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.07770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.14330	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.14330	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.19010	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.19010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.25560	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.25560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.30870	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.30770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.35680	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.35680	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.42230	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.42230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.47540	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.47440	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.52340	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.52340	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.58900	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.58900	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.64200	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.64100	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.69010	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.69010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.75560	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.75560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.80870	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.80770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.85670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.85670	1.00000	1.00000	0.00800	8

O	0.16670	0.00000	0.92220	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.92220	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97530	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.97430	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.06390	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.26940	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.43610	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.60280	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.76940	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.93600	1.00000	1.00000	0.00500	14

42cscs

42cscs.dat

a = 0.5334 [nm]  
 b = 0.9218 [nm]  
 c = 4.2222 [nm]  
 alpha = 90.0000 [deg]  
 beta = 90.0000 [deg]  
 gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 2.0760 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
 + (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 168

## Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.16670	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.16670	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.33330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.33330	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.50000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.50000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.66670	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.66670	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.83330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.83330	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02470	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.02570	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.07770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.07770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.14330	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.14330	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.19010	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.19010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.25560	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.25560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.30870	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.30770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.35680	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.35680	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.42230	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.42230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.47540	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.47440	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.52470	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.52570	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.57780	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.57780	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.64330	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.33330	0.64330	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.69010	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.69010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.75560	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.75560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.80870	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.80770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.85670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.85670	1.00000	1.00000	0.00800	8

O	0.16670	0.00000	0.92220	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.92220	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97530	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.97430	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.06390	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.26940	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.43610	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.56400	1.00000	1.00000	0.00800	14
Si	0.83330	0.16670	0.76940	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.93600	1.00000	1.00000	0.00500	14

42cs-cs

a = 0.5334 [nm]  
b = 0.9218 [nm]  
c = 4.2222 [nm]  
alpha = 90.0000 [deg]  
beta = 90.0000 [deg]  
gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 2.0760 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
+ (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 168

Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.16670	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.16670	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.33330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.33330	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.50000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.50000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.66670	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.66670	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.83330	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.83330	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02470	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.02570	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.07770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.07770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.14330	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.14330	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.19010	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.16670	0.19010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.25560	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.25560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.25560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.30870	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.30870	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.30770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.35680	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.35680	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.42230	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.33330	0.42230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.42230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.47540	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.16670	0.47540	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.47440	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.52470	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.52470	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.52570	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.57780	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.57780	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.57780	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.64330	0.50000	1.00000	0.00500	8
O	0.00000	0.33330	0.64330	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.69010	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.16670	0.69010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.69010	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.75560	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.75560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.75560	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.80870	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.80870	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.80770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.85670	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.85670	1.00000	1.00000	0.00800	8



O	0.16670	0.00000	0.92220	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.92220	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97530	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.97430	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.06390	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.26940	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.43610	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.56400	1.00000	1.00000	0.00800	14
Si	0.83330	0.16670	0.76940	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.93600	1.00000	1.00000	0.00500	14

49sssssc

49csss.dat

a = 0.5334 [nm]  
 b = 0.9218 [nm]  
 c = 4.9259 [nm]  
 alpha = 90.0000 [deg]  
 beta = 90.0000 [deg]  
 gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 2.4220 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
 Total number of atoms in the unit cell : 196

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.14290	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.14290	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.28570	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.28570	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.42860	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.42860	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.57140	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.57140	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.71430	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.71430	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.85720	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.85720	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02110	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.02200	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.06660	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.06660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.12280	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.12280	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.16290	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.16290	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.21910	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.21910	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.26460	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.26370	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.30580	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.30580	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.36190	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.36190	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.40740	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.40660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.44860	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.44860	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.50490	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.50490	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.55030	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.54940	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.59150	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.59150	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.64770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.64770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.69320	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.69230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.73440	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.73440	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.79060	0.50000	1.00000	0.00800	8

O	0.08330	0.25000	0.79060	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.83610	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.83520	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.87730	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.87730	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.93350	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.93350	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97900	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.97810	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.05480	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.23090	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.37380	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.51670	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.65950	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.80240	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.94530	1.00000	1.00000	0.00500	14

49csss.dat

a = 0.5334 [nm]  
 b = 0.9218 [nm]  
 c = 4.9259 [nm]  
 alpha = 90.0000 [deg]  
 beta = 90.0000 [deg]  
 gamma = 90.0000 [deg]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m

Total number of atoms in the unit cell : 196

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.14290	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.14290	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.28570	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.28570	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.42860	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.57150	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.57150	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.71430	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.71430	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.85720	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.85720	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02110	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.02200	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.06660	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.06660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.12280	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.12280	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.16290	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.16290	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.21910	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.21910	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.26460	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.26370	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.30580	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.30580	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.36190	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.36190	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.40740	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.40660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.44970	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.45060	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.49520	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.49520	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.55140	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.55140	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.59160	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.59160	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.64770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.64770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.69320	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.69230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.73440	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.73440	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.79060	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.79060	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.83610	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.83520	1.00000	1.00000	0.00800	8

O	0.00000	0.00000	0.87730	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.87730	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.93350	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.93350	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97900	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.97810	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.05480	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.23090	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.37380	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.48340	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.65950	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.80240	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.94530	1.00000	1.00000	0.00500	14

49cscs.dat

a = 0.5334 [nm]  
 b = 0.9218 [nm]  
 c = 4.9259 [nm]  
 alpha = 90.0000 [deg]  
 beta = 90.0000 [deg]  
 gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 2.4220 [nm<sup>3</sup>]  
 Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m

Total number of atoms in the unit cell : 196

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.14290	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.14290	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.28570	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.28570	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.42860	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.42860	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.57140	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.57140	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.71430	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.71430	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.85720	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.85720	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02110	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.02200	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.06660	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.06660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.12280	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.12280	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.16290	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.16290	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.21910	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.21910	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.26460	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.26370	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.30680	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.30770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.35250	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.35230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.40850	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.40850	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.44860	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.44860	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.50490	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.50490	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.55030	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.54940	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.59150	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.59150	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.64770	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.64770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.69320	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.69230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.73440	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.73440	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.79060	0.50000	1.00000	0.00800	8

O	0.08330	0.25000	0.79060	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.83610	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.83520	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.87730	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.87730	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.93350	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.93350	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97900	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.97810	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.05480	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.23090	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.34050	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.51670	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.65950	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.80240	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.94530	1.00000	1.00000	0.00500	14

49cccs

49cccs.dat

a = 0.5334 [nm]  
 b = 0.9218 [nm]  
 c = 4.9259 [nm]  
 alpha = 90.0000 [deg]  
 beta = 90.0000 [deg]  
 gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 2.4220 [nm<sup>3</sup>]

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
 + (0,0,0 ; 1/2,1/2,0)

Total number of atoms in the unit cell : 196

## Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.14290	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.14290	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.28570	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.28570	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.42860	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.42860	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.00000	0.57140	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.00000	0.33330	0.57140	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.50000	0.71430	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.83330	0.16670	0.71430	1.00000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.50000	0.85720	0.50000	1.00000	0.00500	12
Mg	0.16670	0.16670	0.85720	1.00000	1.00000	0.00500	12
O	0.33330	0.00000	0.02110	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.02200	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.06660	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.06660	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.12280	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.12280	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.16290	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.16290	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.21910	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.21910	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.26460	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.26370	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.30680	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.30770	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.35250	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.35230	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.40850	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.40850	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.44860	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.33330	0.44860	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.50490	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.50490	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.55030	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.54940	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.59250	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.33330	0.59340	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.50000	0.63800	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.63800	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.69420	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.69420	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.73440	0.50000	1.00000	0.00800	8



O	0.16670	0.16670	0.73440	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.00000	0.79060	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.08330	0.25000	0.79060	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.33330	0.00000	0.83610	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.83330	0.16670	0.83520	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.00000	0.87730	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.00000	0.33330	0.87730	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.00000	0.93350	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.41670	0.25000	0.93350	1.00000	1.00000	0.00800	8
O	0.66670	0.00000	0.97900	0.50000	1.00000	0.00800	8
O	0.16670	0.16670	0.97810	1.00000	1.00000	0.00800	8
Si	0.33330	0.33330	0.05480	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.23090	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.34050	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.51670	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.33330	0.33330	0.62620	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.83330	0.16670	0.80240	1.00000	1.00000	0.00500	14
Si	0.16670	0.16670	0.94530	1.00000	1.00000	0.00500	14

SCCCC

c4sxxx.dat

a = 0.5323 [nm]  
 b = 0.9220 [nm]  
 c = 6.4080 [nm]  
 alpha = 90.0000 [deg]  
 beta = 90.0000 [deg]  
 gamma = 90.0000 [deg]

Unit cell volume = 3.1449 [nm<sup>3</sup>]

c4sxxx.dat

Equivalent Point Position for Space-group # 8 : C m  
 Total number of atoms in the unit cell : 252  
 Atoms coordinates

Element	x/a	y/b	z/c	fmult	occup	D-W [nm <sup>2</sup> ]	ato num
Mg	0.00000	0.33330	0.00000	1.00000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.00000	0.00000	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.33330	0.11110	1.00000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.00000	0.11110	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.33330	0.22220	1.00000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.00000	0.22220	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.00000	0.33330	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.33330	0.33330	1.00000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.00000	0.44440	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.33330	0.44440	1.00000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.00000	0.55550	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.33330	0.55550	1.00000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.00000	0.66660	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.33330	0.66660	1.00000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.00000	0.77770	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.00000	0.33330	0.77770	1.00000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.66670	0.00000	0.88880	0.50000	1.00000	0.00000	12
Mg	0.16670	0.16670	0.88880	1.00000	1.00000	0.00000	12
O	0.33330	0.33330	0.01690	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.00000	0.01690	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.08330	0.25000	0.05180	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.50000	0.05180	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.16670	0.09550	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.50000	0.09550	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.33330	0.12670	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.00000	0.12670	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.91670	0.25000	0.17040	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.00000	0.17040	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.16670	0.20540	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.66670	0.00000	0.20540	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.33330	0.23910	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.00000	0.23910	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.50000	0.27400	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.08330	0.25000	0.27400	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.16670	0.31770	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.50000	0.31770	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.00000	0.34890	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.33330	0.34890	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.00000	0.39260	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.91670	0.25000	0.39260	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.66670	0.00000	0.42750	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.16670	0.42750	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.00000	0.46130	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.33330	0.46130	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.50000	0.49620	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.08330	0.25000	0.49620	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.50000	0.53990	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.16670	0.53990	1.00000	1.00000	0.00000	8

O	0.33330	0.00000	0.57110	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.33330	0.57110	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.00000	0.61480	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.91670	0.25000	0.61480	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.66670	0.00000	0.64840	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.16670	0.64970	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.00000	0.68350	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.33330	0.68350	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.50000	0.71840	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.08330	0.25000	0.71840	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.50000	0.76210	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.16670	0.76210	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.00000	0.79330	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.33330	0.79330	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.50000	0.00000	0.83700	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.25000	0.25000	0.83700	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.00000	0.00000	0.87190	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.00000	0.33330	0.87190	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.00000	0.90440	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.33330	0.33330	0.90440	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.00000	0.94810	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.91670	0.25000	0.94810	1.00000	1.00000	0.00000	8
O	0.66670	0.00000	0.98300	0.50000	1.00000	0.00000	8
O	0.16670	0.16670	0.98300	1.00000	1.00000	0.00000	8
Si	0.33330	0.33330	0.04260	1.00000	1.00000	0.00000	14
Si	0.16670	0.16670	0.17960	1.00000	1.00000	0.00000	14
Si	0.33330	0.33330	0.26480	1.00000	1.00000	0.00000	14
Si	0.16670	0.16670	0.40180	1.00000	1.00000	0.00000	14
Si	0.33330	0.33330	0.48700	1.00000	1.00000	0.00000	14
Si	0.16670	0.16670	0.62400	1.00000	1.00000	0.00000	14
Si	0.33330	0.33330	0.70920	1.00000	1.00000	0.00000	14
Si	0.00000	0.33330	0.84620	1.00000	1.00000	0.00000	14
Si	0.16670	0.16670	0.95730	1.00000	1.00000	0.00000	14

c4sxxx.dat

Sorted (h,k,l) list

The list assumes electrons of 200. [kev]

(h,k,l) : (h,k,l) indices

Spac. : (h,k,l) spacing [nm]

St.Am. : modulus of structure amplitude [v]

(h,k,l)	Spac.	St.Am.	(hkl)	Spac.	St.Am.
( 0, 0, 1)	6.4080	0.05	( 0, -2, 0)	0.4610	2.32
( 0, 2, 0)	0.4610	2.32	( -1, -1, 0)	0.4610	0.77
( -1, 1, 0)	0.4610	0.77	( 1, -1, 0)	0.4610	0.77
( 1, 1, 0)	0.4610	0.77	( 0, -2, 1)	0.4598	0.02
( 0, 2, 1)	0.4598	0.02	( 1, 1, 1)	0.4598	0.45
( 1, -1, 1)	0.4598	0.45	( -1, -1, 1)	0.4598	0.32
( -1, 1, 1)	0.4598	0.32	( 0, -2, 2)	0.4563	0.04
( 0, 2, 2)	0.4563	0.04	( 1, 1, 2)	0.4563	0.55
( 1, -1, 2)	0.4563	0.55	( -1, 1, 2)	0.4563	0.24
( -1, -1, 2)	0.4563	0.24	( 0, 2, 3)	0.4506	0.10
( 0, -2, 3)	0.4506	0.10	( 1, 1, 3)	0.4506	0.75
( 1, -1, 3)	0.4506	0.75	( -1, 1, 3)	0.4506	0.10
( -1, -1, 3)	0.4506	0.10	( 0, 2, 4)	0.4430	0.37
( 0, -2, 4)	0.4430	0.37	( -1, -1, 4)	0.4430	0.59
( -1, 1, 4)	0.4430	0.59	( 1, -1, 4)	0.4430	1.69
( 1, 1, 4)	0.4430	1.69	( 0, 2, 5)	0.4338	0.45
( 0, -2, 5)	0.4338	0.45	( 1, 1, 5)	0.4338	1.09
( -1, -1, 5)	0.4338	1.36	( -1, 1, 5)	0.4338	1.36