

AM-88-394

Structure of lengenbachite: a high-resolution transmission electron microscope study

Williams and Pring

TO be deposited: Model Data

American Mineralogist, 73, 11-12, 1426-1433

NGENBACHITE MODEL 2 0.01 35 1.5

18.50000 10.00000 70.00000 90.00000 90.00000 90.00000 (2)

4 192 PB 1.000000

0.0780	0.2500	0.0000	1.0000
0.0983	0.2500	0.0833	1.0000
0.1388	0.2500	0.1667	1.0000
0.1591	0.2500	0.2500	1.0000
0.1388	0.2500	0.3333	1.0000
0.0982	0.2500	0.4167	1.0000
0.0780	0.2500	0.5000	1.0000
0.0983	0.2500	0.5833	1.0000
0.1388	0.2500	0.6667	1.0000
0.1591	0.2500	0.7500	1.0000
0.1388	0.2500	0.8333	1.0000
0.0983	0.2500	0.9167	1.0000
0.0780	0.7500	0.0000	1.0000
0.0983	0.7500	0.0833	1.0000
0.1388	0.7500	0.1667	1.0000
0.1591	0.7500	0.2500	1.0000
0.1388	0.7500	0.3333	1.0000
0.0982	0.7500	0.4167	1.0000
0.0780	0.7500	0.5000	1.0000
0.0983	0.7500	0.5833	1.0000
0.1388	0.7500	0.6667	1.0000
0.1591	0.7500	0.7500	1.0000
0.1388	0.7500	0.8333	1.0000
0.0983	0.7500	0.9167	1.0000
0.0835	0.0000	0.0420	1.0000
0.1187	0.0000	0.1253	1.0000
0.1537	0.0000	0.2087	1.0000
0.1535	0.0000	0.2920	1.0000
0.1184	0.0000	0.3753	1.0000
0.0833	0.0000	0.4587	1.0000
0.0835	0.0000	0.5420	1.0000
0.1187	0.0000	0.6253	1.0000
0.1537	0.0000	0.7087	1.0000
0.1536	0.0000	0.7920	1.0000
0.1184	0.0000	0.8753	1.0000
0.0833	0.0000	0.9587	1.0000
0.0835	0.5000	0.0420	1.0000
0.1187	0.5000	0.1253	1.0000
0.1537	0.5000	0.2087	1.0000
0.1535	0.5000	0.2920	1.0000
0.1184	0.5000	0.3753	1.0000
0.0833	0.5000	0.4587	1.0000
0.0835	0.5000	0.5420	1.0000
0.1187	0.5000	0.6253	1.0000
0.1537	0.5000	0.7087	1.0000
0.1536	0.5000	0.7920	1.0000
0.1184	0.5000	0.8753	1.0000
0.0833	0.5000	0.9587	1.0000
0.2313	0.0000	0.0200	1.0000
0.2596	0.0000	0.1033	1.0000
0.2989	0.0000	0.1867	1.0000
0.3098	0.0000	0.2700	1.0000
0.2814	0.0000	0.3533	1.0000
0.2421	0.0000	0.4367	1.0000

① \bar{x} sampling interval in (Å);
 modulation wave-length (Å);
 peak-to-peak displacement (in Å)

② $\underline{a}, \underline{b}, \underline{c}, \underline{\alpha}, \underline{\beta}, \underline{\gamma}$, cell parameters
 (in Å / degrees)

③ total number of atom types, viz.
 Pb, S, As, Si ;
 N_A atoms of each type, ie $192 \times Pb$
 and Debye-Waller isotropic temperature
 factor

④ Atomic coordinates x, y, z , occupancy.
 x, y, z in fractions of cell parameters.

0.2313	0.0000	0.5200	1.0000
0.2596	0.0000	0.6033	1.0000
0.2989	0.0000	0.6867	1.0000
0.3098	0.0000	0.7700	1.0000
0.2815	0.0000	0.8533	1.0000
0.2422	0.0000	0.9367	1.0000
0.2313	0.5000	0.0200	1.0000
0.2596	0.5000	0.1033	1.0000
0.2989	0.5000	0.1867	1.0000
0.3098	0.5000	0.2700	1.0000
0.2814	0.5000	0.3533	1.0000
0.2421	0.5000	0.4367	1.0000
0.2313	0.5000	0.5200	1.0000
0.2596	0.5000	0.6033	1.0000
0.2989	0.5000	0.6867	1.0000
0.3098	0.5000	0.7700	1.0000
0.2815	0.5000	0.8533	1.0000
0.2422	0.5000	0.9367	1.0000
0.2417	0.2500	0.0620	1.0000
0.2808	0.2500	0.1453	1.0000
0.3096	0.2500	0.2287	1.0000
0.2994	0.2500	0.3120	1.0000
0.2603	0.2500	0.3953	1.0000
0.2314	0.2500	0.4787	1.0000
0.2417	0.2500	0.5620	1.0000
0.2808	0.2500	0.6453	1.0000
0.3096	0.2500	0.7287	1.0000
0.2994	0.2500	0.8120	1.0000
0.2603	0.2500	0.8953	1.0000
0.2314	0.2500	0.9787	1.0000
0.2417	0.7500	0.0620	1.0000
0.2808	0.7500	0.1453	1.0000
0.3096	0.7500	0.2287	1.0000
0.2994	0.7500	0.3120	1.0000
0.2603	0.7500	0.3953	1.0000
0.2314	0.7500	0.4787	1.0000
0.2417	0.7500	0.5620	1.0000
0.2808	0.7500	0.6453	1.0000
0.3096	0.7500	0.7287	1.0000
0.2994	0.7500	0.8120	1.0000
0.2603	0.7500	0.8953	1.0000
0.2314	0.7500	0.9787	1.0000
0.3913	0.2500	0.0200	1.0000
0.4196	0.2500	0.1033	1.0000
0.4589	0.2500	0.1867	1.0000
0.4698	0.2500	0.2700	1.0000
0.4414	0.2500	0.3533	1.0000
0.4021	0.2500	0.4367	1.0000
0.3913	0.2500	0.5200	1.0000
0.4196	0.2500	0.6033	1.0000
0.4589	0.2500	0.6867	1.0000
0.4698	0.2500	0.7700	1.0000
0.4415	0.2500	0.8533	1.0000
0.4022	0.2500	0.9367	1.0000
0.3913	0.7500	0.0200	1.0000
0.4196	0.7500	0.1033	1.0000
0.4589	0.7500	0.1867	1.0000
0.4698	0.7500	0.2700	1.0000

0.4414	0.7500	0.3533	1.0000
0.4021	0.7500	0.4367	1.0000
0.3913	0.7500	0.5200	1.0000
0.4196	0.7500	0.6033	1.0000
0.4589	0.7500	0.6867	1.0000
0.4698	0.7500	0.7700	1.0000
0.4415	0.7500	0.8533	1.0000
0.4022	0.7500	0.9367	1.0000
0.4017	0.0000	0.0620	1.0000
0.4408	0.0000	0.1453	1.0000
0.4696	0.0000	0.2287	1.0000
0.4594	0.0000	0.3120	1.0000
0.4203	0.0000	0.3953	1.0000
0.3914	0.0000	0.4787	1.0000
0.4017	0.0000	0.5620	1.0000
0.4408	0.0000	0.6453	1.0000
0.4696	0.0000	0.7287	1.0000
0.4594	0.0000	0.8120	1.0000
0.4203	0.0000	0.8953	1.0000
0.3914	0.0000	0.9787	1.0000
0.4017	0.5000	0.0620	1.0000
0.4408	0.5000	0.1453	1.0000
0.4696	0.5000	0.2287	1.0000
0.4594	0.5000	0.3120	1.0000
0.4203	0.5000	0.3953	1.0000
0.3914	0.5000	0.4787	1.0000
0.4017	0.5000	0.5620	1.0000
0.4408	0.5000	0.6453	1.0000
0.4696	0.5000	0.7287	1.0000
0.4594	0.5000	0.8120	1.0000
0.4203	0.5000	0.8953	1.0000
0.3914	0.5000	0.9787	1.0000
0.9220	0.0000	0.0000	1.0000
0.9423	0.0000	0.0833	1.0000
0.9828	0.0000	0.1667	1.0000
0.0031	0.0000	0.2500	1.0000
0.9828	0.0000	0.3333	1.0000
0.9422	0.0000	0.4167	1.0000
0.9220	0.0000	0.5000	1.0000
0.9423	0.0000	0.5833	1.0000
0.9828	0.0000	0.6667	1.0000
0.0031	0.0000	0.7500	1.0000
0.9828	0.0000	0.8333	1.0000
0.9423	0.0000	0.9167	1.0000
0.9220	0.5000	0.0000	1.0000
0.9423	0.5000	0.0833	1.0000
0.9828	0.5000	0.1667	1.0000
0.0031	0.5000	0.2500	1.0000
0.9828	0.5000	0.3333	1.0000
0.9422	0.5000	0.4167	1.0000
0.9220	0.5000	0.5000	1.0000
0.9423	0.5000	0.5833	1.0000
0.9828	0.5000	0.6667	1.0000
0.0031	0.5000	0.7500	1.0000
0.9828	0.5000	0.8333	1.0000
0.9423	0.5000	0.9167	1.0000
0.9275	0.2500	0.0420	1.0000
0.9627	0.2500	0.1253	1.0000

0.9977	0.2500	0.2087	1.0000
0.9975	0.2500	0.2920	1.0000
0.9624	0.2500	0.3753	1.0000
0.9273	0.2500	0.4587	1.0000
0.9275	0.2500	0.5420	1.0000
0.9627	0.2500	0.6253	1.0000
0.9977	0.2500	0.7087	1.0000
0.9976	0.2500	0.7920	1.0000
0.9624	0.2500	0.8753	1.0000
0.9273	0.2500	0.9587	1.0000
0.9275	0.7500	0.0420	1.0000
0.9627	0.7500	0.1253	1.0000
0.9977	0.7500	0.2087	1.0000
0.9975	0.7500	0.2920	1.0000
0.9624	0.7500	0.3753	1.0000
0.9273	0.7500	0.4587	1.0000
0.9275	0.7500	0.5420	1.0000
0.9627	0.7500	0.6253	1.0000
0.9977	0.7500	0.7087	1.0000
0.9976	0.7500	0.7920	1.0000
0.9624	0.7500	0.8753	1.0000
0.9273	0.7500	0.9587	1.0000
192 S	1.000000		
0.0780	0.0000	0.0000	1.0000
0.0983	0.0000	0.0833	1.0000
0.1388	0.0000	0.1667	1.0000
0.1591	0.0000	0.2500	1.0000
0.1388	0.0000	0.3333	1.0000
0.0982	0.0000	0.4167	1.0000
0.0780	0.0000	0.5000	1.0000
0.0983	0.0000	0.5833	1.0000
0.1388	0.0000	0.6667	1.0000
0.1591	0.0000	0.7500	1.0000
0.1388	0.0000	0.8333	1.0000
0.0983	0.0000	0.9167	1.0000
0.0780	0.5000	0.0000	1.0000
0.0983	0.5000	0.0833	1.0000
0.1388	0.5000	0.1667	1.0000
0.1591	0.5000	0.2500	1.0000
0.1388	0.5000	0.3333	1.0000
0.0982	0.5000	0.4167	1.0000
0.0780	0.5000	0.5000	1.0000
0.0983	0.5000	0.5833	1.0000
0.1388	0.5000	0.6667	1.0000
0.1591	0.5000	0.7500	1.0000
0.1388	0.5000	0.8333	1.0000
0.0983	0.5000	0.9167	1.0000
0.0835	0.2500	0.0420	1.0000
0.1187	0.2500	0.1253	1.0000
0.1537	0.2500	0.2087	1.0000
0.1535	0.2500	0.2920	1.0000
0.1184	0.2500	0.3753	1.0000
0.0833	0.2500	0.4587	1.0000
0.0835	0.2500	0.5420	1.0000
0.1187	0.2500	0.6253	1.0000
0.1537	0.2500	0.7087	1.0000
0.1536	0.2500	0.7920	1.0000
0.1184	0.2500	0.8753	1.0000

0.0833	0.2500	0.9587	1.0000
0.0835	0.7500	0.0420	1.0000
0.1187	0.7500	0.1253	1.0000
0.1537	0.7500	0.2087	1.0000
0.1535	0.7500	0.2920	1.0000
0.1184	0.7500	0.3753	1.0000
0.0833	0.7500	0.4587	1.0000
0.0835	0.7500	0.5420	1.0000
0.1187	0.7500	0.6253	1.0000
0.1537	0.7500	0.7087	1.0000
0.1536	0.7500	0.7920	1.0000
0.1184	0.7500	0.8753	1.0000
0.0833	0.7500	0.9587	1.0000
0.2313	0.2500	0.0200	1.0000
0.2596	0.2500	0.1033	1.0000
0.2989	0.2500	0.1867	1.0000
0.3098	0.2500	0.2700	1.0000
0.2814	0.2500	0.3533	1.0000
0.2421	0.2500	0.4367	1.0000
0.2313	0.2500	0.5200	1.0000
0.2596	0.2500	0.6033	1.0000
0.2989	0.2500	0.6867	1.0000
0.3098	0.2500	0.7700	1.0000
0.2815	0.2500	0.8533	1.0000
0.2422	0.2500	0.9367	1.0000
0.2313	0.7500	0.0200	1.0000
0.2596	0.7500	0.1033	1.0000
0.2989	0.7500	0.1867	1.0000
0.3098	0.7500	0.2700	1.0000
0.2814	0.7500	0.3533	1.0000
0.2421	0.7500	0.4367	1.0000
0.2313	0.7500	0.5200	1.0000
0.2596	0.7500	0.6033	1.0000
0.2989	0.7500	0.6867	1.0000
0.3098	0.7500	0.7700	1.0000
0.2815	0.7500	0.8533	1.0000
0.2422	0.7500	0.9367	1.0000
0.2417	0.0000	0.0620	1.0000
0.2808	0.0000	0.1453	1.0000
0.3096	0.0000	0.2287	1.0000
0.2994	0.0000	0.3120	1.0000
0.2603	0.0000	0.3953	1.0000
0.2314	0.0000	0.4787	1.0000
0.2417	0.0000	0.5620	1.0000
0.2808	0.0000	0.6453	1.0000
0.3096	0.0000	0.7287	1.0000
0.2994	0.0000	0.8120	1.0000
0.2603	0.0000	0.8953	1.0000
0.2314	0.0000	0.9787	1.0000
0.2417	0.5000	0.0620	1.0000
0.2808	0.5000	0.1453	1.0000
0.3096	0.5000	0.2287	1.0000
0.2994	0.5000	0.3120	1.0000
0.2603	0.5000	0.3953	1.0000
0.2314	0.5000	0.4787	1.0000
0.2417	0.5000	0.5620	1.0000
0.2808	0.5000	0.6453	1.0000
0.3096	0.5000	0.7287	1.0000

0.2994	0.5000	0.8120	1.0000
0.2603	0.5000	0.8953	1.0000
0.2314	0.5000	0.9787	1.0000
0.3913	0.0000	0.0200	1.0000
0.4196	0.0000	0.1033	1.0000
0.4589	0.0000	0.1867	1.0000
0.4698	0.0000	0.2700	1.0000
0.4414	0.0000	0.3533	1.0000
0.4021	0.0000	0.4367	1.0000
0.3913	0.0000	0.5200	1.0000
0.4196	0.0000	0.6033	1.0000
0.4589	0.0000	0.6867	1.0000
0.4698	0.0000	0.7700	1.0000
0.4415	0.0000	0.8533	1.0000
0.4022	0.0000	0.9367	1.0000
0.3913	0.5000	0.0200	1.0000
0.4196	0.5000	0.1033	1.0000
0.4589	0.5000	0.1867	1.0000
0.4698	0.5000	0.2700	1.0000
0.4414	0.5000	0.3533	1.0000
0.4021	0.5000	0.4367	1.0000
0.3913	0.5000	0.5200	1.0000
0.4196	0.5000	0.6033	1.0000
0.4589	0.5000	0.6867	1.0000
0.4698	0.5000	0.7700	1.0000
0.4415	0.5000	0.8533	1.0000
0.4022	0.5000	0.9367	1.0000
0.4017	0.2500	0.0620	1.0000
0.4408	0.2500	0.1453	1.0000
0.4696	0.2500	0.2287	1.0000
0.4594	0.2500	0.3120	1.0000
0.4203	0.2500	0.3953	1.0000
0.3914	0.2500	0.4787	1.0000
0.4017	0.2500	0.5620	1.0000
0.4408	0.2500	0.6453	1.0000
0.4696	0.2500	0.7287	1.0000
0.4594	0.2500	0.8120	1.0000
0.4203	0.2500	0.8953	1.0000
0.3914	0.2500	0.9787	1.0000
0.4017	0.7500	0.0620	1.0000
0.4408	0.7500	0.1453	1.0000
0.4696	0.7500	0.2287	1.0000
0.4594	0.7500	0.3120	1.0000
0.4203	0.7500	0.3953	1.0000
0.3914	0.7500	0.4787	1.0000
0.4017	0.7500	0.5620	1.0000
0.4408	0.7500	0.6453	1.0000
0.4696	0.7500	0.7287	1.0000
0.4594	0.7500	0.8120	1.0000
0.4203	0.7500	0.8953	1.0000
0.3914	0.7500	0.9787	1.0000
0.9220	0.2500	0.0000	1.0000
0.9423	0.2500	0.0833	1.0000
0.9828	0.2500	0.1667	1.0000
0.0031	0.2500	0.2500	1.0000
0.9828	0.2500	0.3333	1.0000
0.9422	0.2500	0.4167	1.0000
0.9220	0.2500	0.5000	1.0000

0.9423	0.2500	0.5833	1.0000
0.9828	0.2500	0.6667	1.0000
0.0031	0.2500	0.7500	1.0000
0.9828	0.2500	0.8333	1.0000
0.9423	0.2500	0.9167	1.0000
0.9220	0.7500	0.0000	1.0000
0.9423	0.7500	0.0833	1.0000
0.9828	0.7500	0.1667	1.0000
0.0031	0.7500	0.2500	1.0000
0.9828	0.7500	0.3333	1.0000
0.9422	0.7500	0.4167	1.0000
0.9220	0.7500	0.5000	1.0000
0.9423	0.7500	0.5833	1.0000
0.9828	0.7500	0.6667	1.0000
0.0031	0.7500	0.7500	1.0000
0.9828	0.7500	0.8333	1.0000
0.9423	0.7500	0.9167	1.0000
0.9275	0.0000	0.0420	1.0000
0.9627	0.0000	0.1253	1.0000
0.9977	0.0000	0.2087	1.0000
0.9975	0.0000	0.2920	1.0000
0.9624	0.0000	0.3753	1.0000
0.9273	0.0000	0.4587	1.0000
0.9275	0.0000	0.5420	1.0000
0.9627	0.0000	0.6253	1.0000
0.9977	0.0000	0.7087	1.0000
0.9976	0.0000	0.7920	1.0000
0.9624	0.0000	0.8753	1.0000
0.9273	0.0000	0.9587	1.0000
0.9275	0.5000	0.0420	1.0000
0.9627	0.5000	0.1253	1.0000
0.9977	0.5000	0.2087	1.0000
0.9975	0.5000	0.2920	1.0000
0.9624	0.5000	0.3753	1.0000
0.9273	0.5000	0.4587	1.0000
0.9275	0.5000	0.5420	1.0000
0.9627	0.5000	0.6253	1.0000
0.9977	0.5000	0.7087	1.0000
0.9976	0.5000	0.7920	1.0000
0.9624	0.5000	0.8753	1.0000
0.9273	0.5000	0.9587	1.0000
132 AS	1.000000		
0.5895	0.0000	0.0120	1.0000
0.6184	0.0000	0.1029	1.0000
0.6604	0.0000	0.1938	1.0000
0.6663	0.0000	0.2847	1.0000
0.6292	0.0000	0.3756	1.0000
0.5925	0.0000	0.4665	1.0000
0.5991	0.0000	0.5575	1.0000
0.6413	0.0000	0.6484	1.0000
0.6697	0.0000	0.7393	1.0000
0.6512	0.0000	0.8302	1.0000
0.6073	0.0000	0.9211	1.0000
0.5895	0.3330	0.0120	1.0000
0.6184	0.3330	0.1029	1.0000
0.6604	0.3330	0.1938	1.0000
0.6663	0.3330	0.2847	1.0000
0.6292	0.3330	0.3756	1.0000

0.5925	0.3330	0.4665	1.0000
0.5991	0.3330	0.5575	1.0000
0.6413	0.3330	0.6484	1.0000
0.6697	0.3330	0.7393	1.0000
0.6512	0.3330	0.8302	1.0000
0.6073	0.3330	0.9211	1.0000
0.5895	0.6660	0.0120	1.0000
0.6184	0.6660	0.1029	1.0000
0.6604	0.6660	0.1938	1.0000
0.6663	0.6660	0.2847	1.0000
0.6292	0.6660	0.3756	1.0000
0.5925	0.6660	0.4665	1.0000
0.5991	0.6660	0.5575	1.0000
0.6413	0.6660	0.6484	1.0000
0.6697	0.6660	0.7393	1.0000
0.6512	0.6660	0.8302	1.0000
0.6073	0.6660	0.9211	1.0000
0.5990	0.1660	0.0570	1.0000
0.6411	0.1660	0.1479	1.0000
0.6697	0.1660	0.2388	1.0000
0.6514	0.1660	0.3297	1.0000
0.6076	0.1660	0.4206	1.0000
0.5894	0.1660	0.5115	1.0000
0.6182	0.1660	0.6025	1.0000
0.6603	0.1660	0.6934	1.0000
0.6664	0.1660	0.7843	1.0000
0.6294	0.1660	0.8752	1.0000
0.5926	0.1660	0.9661	1.0000
0.5990	0.5000	0.0570	1.0000
0.6411	0.5000	0.1479	1.0000
0.6697	0.5000	0.2388	1.0000
0.6514	0.5000	0.3297	1.0000
0.6076	0.5000	0.4206	1.0000
0.5894	0.5000	0.5115	1.0000
0.6182	0.5000	0.6025	1.0000
0.6603	0.5000	0.6934	1.0000
0.6664	0.5000	0.7843	1.0000
0.6294	0.5000	0.8752	1.0000
0.5926	0.5000	0.9661	1.0000
0.5990	0.8330	0.0570	1.0000
0.6411	0.8330	0.1479	1.0000
0.6697	0.8330	0.2388	1.0000
0.6514	0.8330	0.3297	1.0000
0.6076	0.8330	0.4206	1.0000
0.5894	0.8330	0.5115	1.0000
0.6182	0.8330	0.6025	1.0000
0.6603	0.8330	0.6934	1.0000
0.6664	0.8330	0.7843	1.0000
0.6294	0.8330	0.8752	1.0000
0.5926	0.8330	0.9661	1.0000
0.7491	0.0000	0.0360	1.0000
0.7865	0.0000	0.1269	1.0000
0.8228	0.0000	0.2178	1.0000
0.8156	0.0000	0.3087	1.0000
0.7732	0.0000	0.3996	1.0000
0.7453	0.0000	0.4905	1.0000
0.7644	0.0000	0.5815	1.0000
0.8083	0.0000	0.6724	1.0000

0.8255	0.0000	0.7633	1.0000
0.7960	0.0000	0.8542	1.0000
0.7543	0.0000	0.9451	1.0000
0.7491	0.3330	0.0360	1.0000
0.7865	0.3330	0.1269	1.0000
0.8228	0.3330	0.2178	1.0000
0.8156	0.3330	0.3087	1.0000
0.7732	0.3330	0.3996	1.0000
0.7453	0.3330	0.4905	1.0000
0.7644	0.3330	0.5815	1.0000
0.8083	0.3330	0.6724	1.0000
0.8255	0.3330	0.7633	1.0000
0.7960	0.3330	0.8542	1.0000
0.7543	0.3330	0.9451	1.0000
0.7491	0.6660	0.0360	1.0000
0.7865	0.6660	0.1269	1.0000
0.8228	0.6660	0.2178	1.0000
0.8156	0.6660	0.3087	1.0000
0.7732	0.6660	0.3996	1.0000
0.7453	0.6660	0.4905	1.0000
0.7644	0.6660	0.5815	1.0000
0.8083	0.6660	0.6724	1.0000
0.8255	0.6660	0.7633	1.0000
0.7960	0.6660	0.8542	1.0000
0.7543	0.6660	0.9451	1.0000
0.7643	0.1660	0.0810	1.0000
0.8081	0.1660	0.1719	1.0000
0.8256	0.1660	0.2628	1.0000
0.7962	0.1660	0.3537	1.0000
0.7544	0.1660	0.4446	1.0000
0.7490	0.1660	0.5355	1.0000
0.7863	0.1660	0.6265	1.0000
0.8227	0.1660	0.7174	1.0000
0.8157	0.1660	0.8083	1.0000
0.7734	0.1660	0.8992	1.0000
0.7453	0.1660	0.9901	1.0000
0.7643	0.5000	0.0810	1.0000
0.8081	0.5000	0.1719	1.0000
0.8256	0.5000	0.2628	1.0000
0.7962	0.5000	0.3537	1.0000
0.7544	0.5000	0.4446	1.0000
0.7490	0.5000	0.5355	1.0000
0.7863	0.5000	0.6265	1.0000
0.8227	0.5000	0.7174	1.0000
0.8157	0.5000	0.8083	1.0000
0.7734	0.5000	0.8992	1.0000
0.7453	0.5000	0.9901	1.0000
0.7643	0.8330	0.0810	1.0000
0.8081	0.8330	0.1719	1.0000
0.8256	0.8330	0.2628	1.0000
0.7962	0.8330	0.3537	1.0000
0.7544	0.8330	0.4446	1.0000
0.7490	0.8330	0.5355	1.0000
0.7863	0.8330	0.6265	1.0000
0.8227	0.8330	0.7174	1.0000
0.8157	0.8330	0.8083	1.0000
0.7734	0.8330	0.8992	1.0000
0.7453	0.8330	0.9901	1.0000

198 S	1.000000		
0.5110	0.1660	0.0000	1.0000
0.5347	0.1660	0.0909	1.0000
0.5781	0.1660	0.1818	1.0000
0.5905	0.1660	0.2727	1.0000
0.5573	0.1660	0.3636	1.0000
0.5175	0.1660	0.4545	1.0000
0.5174	0.1660	0.5455	1.0000
0.5573	0.1660	0.6364	1.0000
0.5904	0.1660	0.7273	1.0000
0.5781	0.1660	0.8182	1.0000
0.5347	0.1660	0.9091	1.0000
0.5110	0.5000	0.0000	1.0000
0.5347	0.5000	0.0909	1.0000
0.5781	0.5000	0.1818	1.0000
0.5905	0.5000	0.2727	1.0000
0.5573	0.5000	0.3636	1.0000
0.5175	0.5000	0.4545	1.0000
0.5174	0.5000	0.5455	1.0000
0.5573	0.5000	0.6364	1.0000
0.5904	0.5000	0.7273	1.0000
0.5781	0.5000	0.8182	1.0000
0.5347	0.5000	0.9091	1.0000
0.5110	0.8330	0.0000	1.0000
0.5347	0.8330	0.0909	1.0000
0.5781	0.8330	0.1818	1.0000
0.5905	0.8330	0.2727	1.0000
0.5573	0.8330	0.3636	1.0000
0.5175	0.8330	0.4545	1.0000
0.5174	0.8330	0.5455	1.0000
0.5573	0.8330	0.6364	1.0000
0.5904	0.8330	0.7273	1.0000
0.5781	0.8330	0.8182	1.0000
0.5347	0.8330	0.9091	1.0000
0.5173	0.0000	0.0450	1.0000
0.5571	0.0000	0.1359	1.0000
0.5904	0.0000	0.2268	1.0000
0.5782	0.0000	0.3177	1.0000
0.5349	0.0000	0.4086	1.0000
0.5110	0.0000	0.4995	1.0000
0.5345	0.0000	0.5905	1.0000
0.5779	0.0000	0.6814	1.0000
0.5905	0.0000	0.7723	1.0000
0.5575	0.0000	0.8632	1.0000
0.5176	0.0000	0.9541	1.0000
0.5173	0.3330	0.0450	1.0000
0.5571	0.3330	0.1359	1.0000
0.5904	0.3330	0.2268	1.0000
0.5782	0.3330	0.3177	1.0000
0.5349	0.3330	0.4086	1.0000
0.5110	0.3330	0.4995	1.0000
0.5345	0.3330	0.5905	1.0000
0.5779	0.3330	0.6814	1.0000
0.5905	0.3330	0.7723	1.0000
0.5575	0.3330	0.8632	1.0000
0.5176	0.3330	0.9541	1.0000
0.5173	0.6660	0.0450	1.0000
0.5571	0.6660	0.1359	1.0000

0.5904	0.6660	0.2268	1.0000
0.5782	0.6660	0.3177	1.0000
0.5349	0.6660	0.4086	1.0000
0.5110	0.6660	0.4995	1.0000
0.5345	0.6660	0.5905	1.0000
0.5779	0.6660	0.6814	1.0000
0.5905	0.6660	0.7723	1.0000
0.5575	0.6660	0.8632	1.0000
0.5176	0.6660	0.9541	1.0000
0.6677	0.1660	0.0230	1.0000
0.7009	0.1660	0.1139	1.0000
0.7407	0.1660	0.2048	1.0000
0.7406	0.1660	0.2957	1.0000
0.7006	0.1660	0.3866	1.0000
0.6676	0.1660	0.4775	1.0000
0.6801	0.1660	0.5685	1.0000
0.7235	0.1660	0.6594	1.0000
0.7471	0.1660	0.7503	1.0000
0.7232	0.1660	0.8412	1.0000
0.6799	0.1660	0.9321	1.0000
0.6677	0.5000	0.0230	1.0000
0.7009	0.5000	0.1139	1.0000
0.7407	0.5000	0.2048	1.0000
0.7406	0.5000	0.2957	1.0000
0.7006	0.5000	0.3866	1.0000
0.6676	0.5000	0.4775	1.0000
0.6801	0.5000	0.5685	1.0000
0.7235	0.5000	0.6594	1.0000
0.7471	0.5000	0.7503	1.0000
0.7232	0.5000	0.8412	1.0000
0.6799	0.5000	0.9321	1.0000
0.6677	0.8330	0.0230	1.0000
0.7009	0.8330	0.1139	1.0000
0.7407	0.8330	0.2048	1.0000
0.7406	0.8330	0.2957	1.0000
0.7006	0.8330	0.3866	1.0000
0.6676	0.8330	0.4775	1.0000
0.6801	0.8330	0.5685	1.0000
0.7235	0.8330	0.6594	1.0000
0.7471	0.8330	0.7503	1.0000
0.7232	0.8330	0.8412	1.0000
0.6799	0.8330	0.9321	1.0000
0.6799	0.0000	0.0680	1.0000
0.7233	0.0000	0.1589	1.0000
0.7471	0.0000	0.2498	1.0000
0.7234	0.0000	0.3407	1.0000
0.6801	0.0000	0.4316	1.0000
0.6676	0.0000	0.5225	1.0000
0.7007	0.0000	0.6135	1.0000
0.7406	0.0000	0.7044	1.0000
0.7407	0.0000	0.7953	1.0000
0.7008	0.0000	0.8862	1.0000
0.6677	0.0000	0.9771	1.0000
0.6799	0.3330	0.0680	1.0000
0.7233	0.3330	0.1589	1.0000
0.7471	0.3330	0.2498	1.0000
0.7234	0.3330	0.3407	1.0000
0.6801	0.3330	0.4316	1.0000

0.6676	0.3330	0.5225	1.0000
0.7007	0.3330	0.6135	1.0000
0.7406	0.3330	0.7044	1.0000
0.7407	0.3330	0.7953	1.0000
0.7008	0.3330	0.8862	1.0000
0.6677	0.3330	0.9771	1.0000
0.6799	0.6660	0.0680	1.0000
0.7233	0.6660	0.1589	1.0000
0.7471	0.6660	0.2498	1.0000
0.7234	0.6660	0.3407	1.0000
0.6801	0.6660	0.4316	1.0000
0.6676	0.6660	0.5225	1.0000
0.7007	0.6660	0.6135	1.0000
0.7406	0.6660	0.7044	1.0000
0.7407	0.6660	0.7953	1.0000
0.7008	0.6660	0.8862	1.0000
0.6677	0.6660	0.9771	1.0000
0.8230	0.0000	0.0000	1.0000
0.8467	0.0000	0.0909	1.0000
0.8901	0.0000	0.1818	1.0000
0.9025	0.0000	0.2727	1.0000
0.8693	0.0000	0.3636	1.0000
0.8295	0.0000	0.4545	1.0000
0.8294	0.0000	0.5455	1.0000
0.8693	0.0000	0.6364	1.0000
0.9024	0.0000	0.7273	1.0000
0.8901	0.0000	0.8182	1.0000
0.8467	0.0000	0.9091	1.0000
0.8230	0.3330	0.0000	1.0000
0.8467	0.3330	0.0909	1.0000
0.8901	0.3330	0.1818	1.0000
0.9025	0.3330	0.2727	1.0000
0.8693	0.3330	0.3636	1.0000
0.8295	0.3330	0.4545	1.0000
0.8294	0.3330	0.5455	1.0000
0.8693	0.3330	0.6364	1.0000
0.9024	0.3330	0.7273	1.0000
0.8901	0.3330	0.8182	1.0000
0.8467	0.3330	0.9091	1.0000
0.8230	0.6660	0.0000	1.0000
0.8467	0.6660	0.0909	1.0000
0.8901	0.6660	0.1818	1.0000
0.9025	0.6660	0.2727	1.0000
0.8693	0.6660	0.3636	1.0000
0.8295	0.6660	0.4545	1.0000
0.8294	0.6660	0.5455	1.0000
0.8693	0.6660	0.6364	1.0000
0.9024	0.6660	0.7273	1.0000
0.8901	0.6660	0.8182	1.0000
0.8467	0.6660	0.9091	1.0000
0.8293	0.1660	0.0450	1.0000
0.8691	0.1660	0.1359	1.0000
0.9024	0.1660	0.2268	1.0000
0.8902	0.1660	0.3177	1.0000
0.8469	0.1660	0.4086	1.0000
0.8230	0.1660	0.4995	1.0000
0.8465	0.1660	0.5905	1.0000
0.8899	0.1660	0.6814	1.0000

0.9025	0.1660	0.7723	1.0000
0.8695	0.1660	0.8632	1.0000
0.8296	0.1660	0.9541	1.0000
0.8293	0.5000	0.0450	1.0000
0.8691	0.5000	0.1359	1.0000
0.9024	0.5000	0.2268	1.0000
0.8902	0.5000	0.3177	1.0000
0.8469	0.5000	0.4086	1.0000
0.8230	0.5000	0.4995	1.0000
0.8465	0.5000	0.5905	1.0000
0.8899	0.5000	0.6814	1.0000
0.9025	0.5000	0.7723	1.0000
0.8695	0.5000	0.8632	1.0000
0.8296	0.5000	0.9541	1.0000
0.8293	0.8330	0.0450	1.0000
0.8691	0.8330	0.1359	1.0000
0.9024	0.8330	0.2268	1.0000
0.8902	0.8330	0.3177	1.0000
0.8469	0.8330	0.4086	1.0000
0.8230	0.8330	0.4995	1.0000
0.8465	0.8330	0.5905	1.0000
0.8899	0.8330	0.6814	1.0000
0.9025	0.8330	0.7723	1.0000
0.8695	0.8330	0.8632	1.0000
0.8296	0.8330	0.9541	1.0000