

Table 5a. Site occupancies, atomic positions and anisotropic displacement parameters of crystal N.35 before and after annealing at 700°C.

PIG BTS-308 N.35 untreated

#

#LIST 5

```

READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.596601 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 26.5302258
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867633 0.338142 0.168299
CON U[11]= 0.006561 0.009023 0.009713 0.000062 0.002613 0.000532
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 1.000000 0.500000 0.000000 0.867633 0.338142 0.168299
CON U[11]= 0.006561 0.009023 0.009713 0.000062 0.002613 0.000532
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 2.000000 0.500000 0.000000 0.373603 0.836609 0.134765
CON U[11]= 0.007080 0.009612 0.009962 -0.000022 0.002903 0.000376
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 2.000000 0.500000 0.000000 0.373603 0.836609 0.134765
CON U[11]= 0.007080 0.009612 0.009962 -0.000022 0.002903 0.000376
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 3.000000 0.500000 0.000000 0.121624 0.499486 0.332181
CON U[11]= 0.012521 0.008224 0.013628 -0.001811 0.005907 -0.003275
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 3.000000 0.500000 0.000000 0.121624 0.499486 0.332181
CON U[11]= 0.012521 0.008224 0.013628 -0.001811 0.005907 -0.003275
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 4.000000 0.500000 0.000000 0.628732 0.987868 0.372233
CON U[11]= 0.014739 0.011594 0.021224 -0.007512 0.010302 -0.006085
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 4.000000 0.500000 0.000000 0.628732 0.987868 0.372233
CON U[11]= 0.014739 0.011594 0.021224 -0.007512 0.010302 -0.006085
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 5.000000 0.500000 0.000000 0.104270 0.261080 0.576279
CON U[11]= 0.009289 0.023267 0.021057 0.014429 0.004399 0.000787
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 5.000000 0.500000 0.000000 0.104270 0.261080 0.576279
CON U[11]= 0.009289 0.023267 0.021057 0.014429 0.004399 0.000787
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 6.000000 0.500000 0.000000 0.604937 0.709499 0.481649
CON U[11]= 0.008494 0.021313 0.012807 0.007685 0.003991 0.000717
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 6.000000 0.500000 0.000000 0.604937 0.709499 0.481649
CON U[11]= 0.008494 0.021313 0.012807 0.007685 0.003991 0.000717
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 7.000000 0.500000 0.000000 0.042638 0.340507 0.275819
CON U[11]= 0.006146 0.006198 0.009999 -0.000616 0.003367 -0.000581
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SIP4 7.000000 0.500000 0.000000 0.042638 0.340507 0.275819
CON U[11]= 0.006146 0.006198 0.009999 -0.000616 0.003367 -0.000581
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 8.000000 0.484063 0.000000 0.549269 0.837496 0.238663
CON U[11]= 0.006599 0.006249 0.007780 -0.000944 0.002828 -0.001068
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0

```

```

ATOM SIP4  8.000000  0.484063  0.000000  0.549269  0.837496  0.238663
CON U[11]= 0.006599  0.006249  0.007780 -0.000944  0.002828 -0.001068
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  8.000000  0.031875  0.000000  0.549269  0.837496  0.238663
CON U[11]= 0.006599  0.006249  0.007780 -0.000944  0.002828 -0.001068
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2  9.000000  0.776438  0.000000  0.250490  0.654727  0.232121
CON U[11]= 0.008018  0.006763  0.007727  0.000458  0.002449  0.000121
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2  9.000000  0.196033  0.000000  0.250490  0.654727  0.232121
CON U[11]= 0.008018  0.006763  0.007727  0.000458  0.002449  0.000121
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP3  9.000000  0.014653  0.000000  0.250490  0.654727  0.232121
CON U[11]= 0.008018  0.006763  0.007727  0.000458  0.002449  0.000121
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250490  0.654727  0.232121
CON U[11]= 0.008018  0.006763  0.007727  0.000458  0.002449  0.000121
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250490  0.654727  0.232121
CON U[11]= 0.008018  0.006763  0.007727  0.000458  0.002449  0.000121
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010127  0.000000  0.250490  0.654727  0.232121
CON U[11]= 0.008018  0.006763  0.007727  0.000458  0.002449  0.000121
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.002749  0.000000  0.250490  0.654727  0.232121
CON U[11]= 0.008018  0.006763  0.007727  0.000458  0.002449  0.000121
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.143694  0.000000  0.255192  0.017045  0.228309
CON U[11]= 0.010112  0.011311  0.007101  0.000456  0.000647  0.001611
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.636216  0.000000  0.255192  0.017045  0.228309
CON U[11]= 0.010112  0.011311  0.007101  0.000456  0.000647  0.001611
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.078393  0.000000  0.255192  0.017045  0.228309
CON U[11]= 0.010112  0.011311  0.007101  0.000456  0.000647  0.001611
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025869  0.000000  0.255192  0.017045  0.228309
CON U[11]= 0.010112  0.011311  0.007101  0.000456  0.000647  0.001611
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.003032  0.000000  0.255192  0.017045  0.228309
CON U[11]= 0.010112  0.011311  0.007101  0.000456  0.000647  0.001611
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.112795  1.000000  0.254036  0.049506  0.249442
CON U[11]= 0.011423  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
END
PIG BTS-308 N.35 700°C 10 min
#
#LIST 5
READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.597205 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 28.2865067
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867648 0.338212 0.168308
CON U[11]= 0.006543 0.009127 0.009852 -0.000147 0.002670 0.000145
CON SPARE= 1.00      0 25165824      0

```

ATOM OM2	1.000000	0.500000	0.000000	0.867648	0.338212	0.168308
CON U[11]=	0.006543	0.009127	0.009852	-0.000147	0.002670	0.000145
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	2.000000	0.500000	0.000000	0.373643	0.836670	0.134859
CON U[11]=	0.007149	0.009144	0.010226	-0.000106	0.003312	0.000213
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	2.000000	0.500000	0.000000	0.373643	0.836670	0.134859
CON U[11]=	0.007149	0.009144	0.010226	-0.000106	0.003312	0.000213
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	3.000000	0.500000	0.000000	0.121580	0.499459	0.332112
CON U[11]=	0.012883	0.008605	0.013443	-0.001640	0.006090	-0.003279
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	3.000000	0.500000	0.000000	0.121580	0.499459	0.332112
CON U[11]=	0.012883	0.008605	0.013443	-0.001640	0.006090	-0.003279
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	4.000000	0.500000	0.000000	0.628662	0.987816	0.372068
CON U[11]=	0.014679	0.011356	0.021234	-0.007620	0.010112	-0.005953
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	4.000000	0.500000	0.000000	0.628662	0.987816	0.372068
CON U[11]=	0.014679	0.011356	0.021234	-0.007620	0.010112	-0.005953
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	5.000000	0.500000	0.000000	0.104147	0.260814	0.575613
CON U[11]=	0.008351	0.023596	0.021535	0.015074	0.004262	0.000707
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104147	0.260814	0.575613
CON U[11]=	0.008351	0.023596	0.021535	0.015074	0.004262	0.000707
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604880	0.709521	0.481878
CON U[11]=	0.007746	0.019677	0.013302	0.007742	0.003369	0.000738
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604880	0.709521	0.481878
CON U[11]=	0.007746	0.019677	0.013302	0.007742	0.003369	0.000738
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042724	0.340569	0.276099
CON U[11]=	0.005954	0.006368	0.010041	-0.000737	0.003389	-0.000484
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042724	0.340569	0.276099
CON U[11]=	0.005954	0.006368	0.010041	-0.000737	0.003389	-0.000484
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.484060	0.000000	0.549302	0.837437	0.238780
CON U[11]=	0.006294	0.006299	0.007849	-0.000871	0.002728	-0.001011
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.484060	0.000000	0.549302	0.837437	0.238780
CON U[11]=	0.006294	0.006299	0.007849	-0.000871	0.002728	-0.001011
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.031879	0.000000	0.549302	0.837437	0.238780
CON U[11]=	0.006294	0.006299	0.007849	-0.000871	0.002728	-0.001011
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.770478	0.000000	0.250449	0.654666	0.232018
CON U[11]=	0.007892	0.006868	0.007510	0.000322	0.002515	0.000123
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.201856	0.000000	0.250449	0.654666	0.232018
CON U[11]=	0.007892	0.006868	0.007510	0.000322	0.002515	0.000123
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM FEP3  9.000000  0.014648  0.000000  0.250449  0.654666  0.232018
CON U[11]= 0.007892  0.006868  0.007510  0.000322  0.002515  0.000123
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250449  0.654666  0.232018
CON U[11]= 0.007892  0.006868  0.007510  0.000322  0.002515  0.000123
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250449  0.654666  0.232018
CON U[11]= 0.007892  0.006868  0.007510  0.000322  0.002515  0.000123
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010179  0.000000  0.250449  0.654666  0.232018
CON U[11]= 0.007892  0.006868  0.007510  0.000322  0.002515  0.000123
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.002837  0.000000  0.250449  0.654666  0.232018
CON U[11]= 0.007892  0.006868  0.007510  0.000322  0.002515  0.000123
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.151876  0.000000  0.255175  0.016824  0.228003
CON U[11]= 0.009804  0.010982  0.006652  0.000330  0.000634  0.001771
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.627868  0.000000  0.255175  0.016824  0.228003
CON U[11]= 0.009804  0.010982  0.006652  0.000330  0.000634  0.001771
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.068516  0.000000  0.255175  0.016824  0.228003
CON U[11]= 0.009804  0.010982  0.006652  0.000330  0.000634  0.001771
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025594  0.000000  0.255175  0.016824  0.228003
CON U[11]= 0.009804  0.010982  0.006652  0.000330  0.000634  0.001771
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.003128  0.000000  0.255175  0.016824  0.228003
CON U[11]= 0.009804  0.010982  0.006652  0.000330  0.000634  0.001771
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.123019  1.000000  0.254366  0.048966  0.251399
CON U[11]= 0.011947  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
END
PIG BTS-308 N.35 700°C 20 min
#
#LIST  5
READ NATOM =  30,NLAYER =  0,NELEMENT =  0,NBATCH =  0
OVERALL  0.586174  0.050000  0.050000  1.000000  0.000000  29.8630943
ATOM O    1.000000  0.500000  0.000000  0.867567  0.338158  0.168337
CON U[11]= 0.006511  0.009185  0.009683  0.000057  0.002699  0.000298
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  1.000000  0.500000  0.000000  0.867567  0.338158  0.168337
CON U[11]= 0.006511  0.009185  0.009683  0.000057  0.002699  0.000298
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0
ATOM O    2.000000  0.500000  0.000000  0.373598  0.836571  0.134869
CON U[11]= 0.006819  0.009626  0.009984 -0.000047  0.003004  0.000187
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  2.000000  0.500000  0.000000  0.373598  0.836571  0.134869
CON U[11]= 0.006819  0.009626  0.009984 -0.000047  0.003004  0.000187
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0
ATOM O    3.000000  0.500000  0.000000  0.121531  0.499429  0.332093
CON U[11]= 0.012442  0.008799  0.013176 -0.001310  0.006069 -0.003649
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0

```

ATOM OM2	3.000000	0.500000	0.000000	0.121531	0.499429	0.332093
CON U[11]=	0.012442	0.008799	0.013176	-0.001310	0.006069	-0.003649
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	4.000000	0.500000	0.000000	0.628675	0.987776	0.371983
CON U[11]=	0.014459	0.011626	0.021699	-0.007520	0.010426	-0.006207
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	4.000000	0.500000	0.000000	0.628675	0.987776	0.371983
CON U[11]=	0.014459	0.011626	0.021699	-0.007520	0.010426	-0.006207
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	5.000000	0.500000	0.000000	0.104077	0.261054	0.576241
CON U[11]=	0.008430	0.023232	0.020936	0.013858	0.004143	0.000398
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104077	0.261054	0.576241
CON U[11]=	0.008430	0.023232	0.020936	0.013858	0.004143	0.000398
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604868	0.709349	0.481560
CON U[11]=	0.007418	0.019820	0.013563	0.007992	0.003382	0.000328
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604868	0.709349	0.481560
CON U[11]=	0.007418	0.019820	0.013563	0.007992	0.003382	0.000328
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042741	0.340553	0.275997
CON U[11]=	0.005922	0.006463	0.010119	-0.000667	0.003336	-0.000549
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042741	0.340553	0.275997
CON U[11]=	0.005922	0.006463	0.010119	-0.000667	0.003336	-0.000549
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.484018	0.000000	0.549321	0.837429	0.238665
CON U[11]=	0.006232	0.006442	0.007641	-0.000971	0.002677	-0.001078
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.484018	0.000000	0.549321	0.837429	0.238665
CON U[11]=	0.006232	0.006442	0.007641	-0.000971	0.002677	-0.001078
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.031964	0.000000	0.549321	0.837429	0.238665
CON U[11]=	0.006232	0.006442	0.007641	-0.000971	0.002677	-0.001078
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.764967	0.000000	0.250434	0.654621	0.232036
CON U[11]=	0.007862	0.007063	0.007474	0.000402	0.002392	0.000191
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.207181	0.000000	0.250434	0.654621	0.232036
CON U[11]=	0.007862	0.007063	0.007474	0.000402	0.002392	0.000191
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014805	0.000000	0.250434	0.654621	0.232036
CON U[11]=	0.007862	0.007063	0.007474	0.000402	0.002392	0.000191
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250434	0.654621	0.232036
CON U[11]=	0.007862	0.007063	0.007474	0.000402	0.002392	0.000191
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250434	0.654621	0.232036
CON U[11]=	0.007862	0.007063	0.007474	0.000402	0.002392	0.000191
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010095	0.000000	0.250434	0.654621	0.232036
CON U[11]=	0.007862	0.007063	0.007474	0.000402	0.002392	0.000191
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM MNP2  9.000000  0.002952  0.000000  0.250434  0.654621  0.232036
CON U[11]=  0.007862  0.007063  0.007474  0.000402  0.002392  0.000191
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MGP2  10.000000  0.153901  0.000000  0.255195  0.016378  0.227770
CON U[11]=  0.009633  0.010408  0.006359  0.000099  0.000355  0.001719
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP2  10.000000  0.625892  0.000000  0.255195  0.016378  0.227770
CON U[11]=  0.009633  0.010408  0.006359  0.000099  0.000355  0.001719
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2  10.000000  0.041701  0.000000  0.255195  0.016378  0.227770
CON U[11]=  0.009633  0.010408  0.006359  0.000099  0.000355  0.001719
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2  10.000000  0.025863  0.000000  0.255195  0.016378  0.227770
CON U[11]=  0.009633  0.010408  0.006359  0.000099  0.000355  0.001719
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1  10.000000  0.003030  0.000000  0.255195  0.016378  0.227770
CON U[11]=  0.009633  0.010408  0.006359  0.000099  0.000355  0.001719
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2  11.000000  0.149614  1.000000  0.254515  0.046766  0.248789
CON U[11]=  0.012800  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
END

```

PIG BTS-308 N.35 700°C 30 min

#

#LIST 5

```

READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL  0.597212  0.050000  0.050000  1.000000  0.000000  28.7074413
ATOM O    1.000000  0.500000  0.000000  0.867607  0.338152  0.168397
CON U[11]=  0.006136  0.009434  0.009516 -0.000189  0.002695  0.000266
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  1.000000  0.500000  0.000000  0.867607  0.338152  0.168397
CON U[11]=  0.006136  0.009434  0.009516 -0.000189  0.002695  0.000266
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    2.000000  0.500000  0.000000  0.373598  0.836558  0.134631
CON U[11]=  0.006870  0.009857  0.009276 -0.000025  0.003161  0.000853
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  2.000000  0.500000  0.000000  0.373598  0.836558  0.134631
CON U[11]=  0.006870  0.009857  0.009276 -0.000025  0.003161  0.000853
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    3.000000  0.500000  0.000000  0.121617  0.499487  0.331951
CON U[11]=  0.012329  0.008561  0.013115 -0.001490  0.006020 -0.003371
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  3.000000  0.500000  0.000000  0.121617  0.499487  0.331951
CON U[11]=  0.012329  0.008561  0.013115 -0.001490  0.006020 -0.003371
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    4.000000  0.500000  0.000000  0.628802  0.987730  0.372164
CON U[11]=  0.013914  0.012181  0.020690 -0.007734  0.009799 -0.005909
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  4.000000  0.500000  0.000000  0.628802  0.987730  0.372164
CON U[11]=  0.013914  0.012181  0.020690 -0.007734  0.009799 -0.005909
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    5.000000  0.500000  0.000000  0.104127  0.261162  0.575990
CON U[11]=  0.008378  0.021988  0.020827  0.013592  0.003555 -0.000004
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0

```

ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104127	0.261162	0.575990
CON U[11]=	0.008378	0.021988	0.020827	0.013592	0.003555	-0.000004
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604690	0.709516	0.481112
CON U[11]=	0.007572	0.019643	0.013321	0.008103	0.003398	0.000531
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604690	0.709516	0.481112
CON U[11]=	0.007572	0.019643	0.013321	0.008103	0.003398	0.000531
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042790	0.340603	0.276138
CON U[11]=	0.005990	0.006121	0.010041	-0.000624	0.003395	-0.000501
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042790	0.340603	0.276138
CON U[11]=	0.005990	0.006121	0.010041	-0.000624	0.003395	-0.000501
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.483995	0.000000	0.549378	0.837484	0.238604
CON U[11]=	0.006307	0.006105	0.007522	-0.000976	0.002733	-0.001082
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.483995	0.000000	0.549378	0.837484	0.238604
CON U[11]=	0.006307	0.006105	0.007522	-0.000976	0.002733	-0.001082
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032011	0.000000	0.549378	0.837484	0.238604
CON U[11]=	0.006307	0.006105	0.007522	-0.000976	0.002733	-0.001082
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.761298	0.000000	0.250455	0.654629	0.231946
CON U[11]=	0.007900	0.006743	0.007402	0.000374	0.002435	0.000044
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.210752	0.000000	0.250455	0.654629	0.231946
CON U[11]=	0.007900	0.006743	0.007402	0.000374	0.002435	0.000044
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014875	0.000000	0.250455	0.654629	0.231946
CON U[11]=	0.007900	0.006743	0.007402	0.000374	0.002435	0.000044
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250455	0.654629	0.231946
CON U[11]=	0.007900	0.006743	0.007402	0.000374	0.002435	0.000044
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250455	0.654629	0.231946
CON U[11]=	0.007900	0.006743	0.007402	0.000374	0.002435	0.000044
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010045	0.000000	0.250455	0.654629	0.231946
CON U[11]=	0.007900	0.006743	0.007402	0.000374	0.002435	0.000044
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003030	0.000000	0.250455	0.654629	0.231946
CON U[11]=	0.007900	0.006743	0.007402	0.000374	0.002435	0.000044
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.155079	0.000000	0.255178	0.016731	0.227992
CON U[11]=	0.009961	0.010658	0.006542	0.000424	0.000539	0.001749
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	10.000000	0.624765	0.000000	0.255178	0.016731	0.227992
CON U[11]=	0.009961	0.010658	0.006542	0.000424	0.000539	0.001749
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	10.000000	0.064696	0.000000	0.255178	0.016731	0.227992
CON U[11]=	0.009961	0.010658	0.006542	0.000424	0.000539	0.001749
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM MNP2  10.000000  0.026051  0.000000  0.255178  0.016731  0.227992
CON U[11]=  0.009961  0.010658  0.006542  0.000424  0.000539  0.001749
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM NAP1  10.000000  0.002954  0.000000  0.255178  0.016731  0.227992
CON U[11]=  0.009961  0.010658  0.006542  0.000424  0.000539  0.001749
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2  11.000000  0.126455  1.000000  0.254518  0.048988  0.249693
CON U[11]=  0.011822  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
END
PIG BTS-308 N.35 700°C 50 min
#
#LIST    5
READ NATOM =   30, NLAYER =   0, NELEMENT =   0, NBATCH =   0
OVERALL  0.600741 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000    26.7229137
ATOM O    1.000000 0.500000 0.000000 0.867653 0.338136 0.168662
CON U[11]= 0.006510 0.009159 0.009649 -0.000044 0.002632 0.000262
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2   1.000000 0.500000 0.000000 0.867653 0.338136 0.168662
CON U[11]= 0.006510 0.009159 0.009649 -0.000044 0.002632 0.000262
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O     2.000000 0.500000 0.000000 0.373534 0.836612 0.134596
CON U[11]= 0.007187 0.009343 0.009992 0.000019 0.002896 0.000460
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2   2.000000 0.500000 0.000000 0.373534 0.836612 0.134596
CON U[11]= 0.007187 0.009343 0.009992 0.000019 0.002896 0.000460
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O     3.000000 0.500000 0.000000 0.121559 0.499573 0.332035
CON U[11]= 0.013078 0.007921 0.014102 -0.001456 0.006603 -0.003259
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2   3.000000 0.500000 0.000000 0.121559 0.499573 0.332035
CON U[11]= 0.013078 0.007921 0.014102 -0.001456 0.006603 -0.003259
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O     4.000000 0.500000 0.000000 0.628802 0.987827 0.372569
CON U[11]= 0.014486 0.011598 0.020944 -0.007057 0.010136 -0.005803
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2   4.000000 0.500000 0.000000 0.628802 0.987827 0.372569
CON U[11]= 0.014486 0.011598 0.020944 -0.007057 0.010136 -0.005803
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O     5.000000 0.500000 0.000000 0.104157 0.261208 0.576601
CON U[11]= 0.007971 0.023237 0.020596 0.014404 0.003929 0.000275
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2   5.000000 0.500000 0.000000 0.104157 0.261208 0.576601
CON U[11]= 0.007971 0.023237 0.020596 0.014404 0.003929 0.000275
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O     6.000000 0.500000 0.000000 0.604852 0.709118 0.481534
CON U[11]= 0.007324 0.020455 0.012805 0.007788 0.003094 0.000268
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2   6.000000 0.500000 0.000000 0.604852 0.709118 0.481534
CON U[11]= 0.007324 0.020455 0.012805 0.007788 0.003094 0.000268
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM SI    7.000000 0.500000 0.000000 0.042738 0.340550 0.276215
CON U[11]= 0.005950 0.006317 0.009821 -0.000614 0.003354 -0.000574
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0

```


ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042738	0.340550	0.276215
CON U[11]=	0.005950	0.006317	0.009821	-0.000614	0.003354	-0.000574
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.484013	0.000000	0.549291	0.837473	0.238617
CON U[11]=	0.006355	0.006151	0.007352	-0.000938	0.002710	-0.000987
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.484013	0.000000	0.549291	0.837473	0.238617
CON U[11]=	0.006355	0.006151	0.007352	-0.000938	0.002710	-0.000987
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.031973	0.000000	0.549291	0.837473	0.238617
CON U[11]=	0.006355	0.006151	0.007352	-0.000938	0.002710	-0.000987
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.756510	0.000000	0.250406	0.654637	0.231905
CON U[11]=	0.007893	0.006832	0.007470	0.000478	0.002548	0.000218
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.215484	0.000000	0.250406	0.654637	0.231905
CON U[11]=	0.007893	0.006832	0.007470	0.000478	0.002548	0.000218
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014826	0.000000	0.250406	0.654637	0.231905
CON U[11]=	0.007893	0.006832	0.007470	0.000478	0.002548	0.000218
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250406	0.654637	0.231905
CON U[11]=	0.007893	0.006832	0.007470	0.000478	0.002548	0.000218
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250406	0.654637	0.231905
CON U[11]=	0.007893	0.006832	0.007470	0.000478	0.002548	0.000218
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010092	0.000000	0.250406	0.654637	0.231905
CON U[11]=	0.007893	0.006832	0.007470	0.000478	0.002548	0.000218
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003088	0.000000	0.250406	0.654637	0.231905
CON U[11]=	0.007893	0.006832	0.007470	0.000478	0.002548	0.000218
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.162784	0.000000	0.255237	0.016458	0.227752
CON U[11]=	0.009832	0.010263	0.006467	0.000228	0.000669	0.001978
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	10.000000	0.617237	0.000000	0.255237	0.016458	0.227752
CON U[11]=	0.009832	0.010263	0.006467	0.000228	0.000669	0.001978
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	10.000000	0.050405	0.000000	0.255237	0.016458	0.227752
CON U[11]=	0.009832	0.010263	0.006467	0.000228	0.000669	0.001978
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	10.000000	0.025649	0.000000	0.255237	0.016458	0.227752
CON U[11]=	0.009832	0.010263	0.006467	0.000228	0.000669	0.001978
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM NAP1	10.000000	0.003036	0.000000	0.255237	0.016458	0.227752
CON U[11]=	0.009832	0.010263	0.006467	0.000228	0.000669	0.001978
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	11.000000	0.140888	1.000000	0.253810	0.047303	0.248865
CON U[11]=	0.011389	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

END

PIG BTS-308 N.35 700°C 90 min

#

#LIST 5

```
READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.591291 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 25.4108562
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867667 0.338264 0.168694
CON U[11]= 0.006401 0.009375 0.009084 -0.000162 0.002511 0.000371
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 1.000000 0.500000 0.000000 0.867667 0.338264 0.168694
CON U[11]= 0.006401 0.009375 0.009084 -0.000162 0.002511 0.000371
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 2.000000 0.500000 0.000000 0.373637 0.836677 0.134863
CON U[11]= 0.006829 0.009743 0.009696 -0.000181 0.003122 0.000180
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 2.000000 0.500000 0.000000 0.373637 0.836677 0.134863
CON U[11]= 0.006829 0.009743 0.009696 -0.000181 0.003122 0.000180
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 3.000000 0.500000 0.000000 0.121428 0.499568 0.331890
CON U[11]= 0.012573 0.008123 0.013352 -0.001799 0.005940 -0.003330
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 3.000000 0.500000 0.000000 0.121428 0.499568 0.331890
CON U[11]= 0.012573 0.008123 0.013352 -0.001799 0.005940 -0.003330
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 4.000000 0.500000 0.000000 0.628726 0.987748 0.372520
CON U[11]= 0.014526 0.011821 0.021272 -0.007734 0.010539 -0.006052
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 4.000000 0.500000 0.000000 0.628726 0.987748 0.372520
CON U[11]= 0.014526 0.011821 0.021272 -0.007734 0.010539 -0.006052
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 5.000000 0.500000 0.000000 0.104213 0.261526 0.576927
CON U[11]= 0.008314 0.022677 0.020132 0.013539 0.003881 0.000318
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 5.000000 0.500000 0.000000 0.104213 0.261526 0.576927
CON U[11]= 0.008314 0.022677 0.020132 0.013539 0.003881 0.000318
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 6.000000 0.500000 0.000000 0.604810 0.709253 0.481418
CON U[11]= 0.007234 0.020666 0.012855 0.007765 0.003072 0.000537
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 6.000000 0.500000 0.000000 0.604810 0.709253 0.481418
CON U[11]= 0.007234 0.020666 0.012855 0.007765 0.003072 0.000537
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 7.000000 0.500000 0.000000 0.042762 0.340538 0.276342
CON U[11]= 0.005816 0.006265 0.009845 -0.000636 0.003324 -0.000562
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SIP4 7.000000 0.500000 0.000000 0.042762 0.340538 0.276342
CON U[11]= 0.005816 0.006265 0.009845 -0.000636 0.003324 -0.000562
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 8.000000 0.484058 0.000000 0.549342 0.837438 0.238697
CON U[11]= 0.006371 0.006137 0.007362 -0.001044 0.002787 -0.001128
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
ATOM SIP4 8.000000 0.484058 0.000000 0.549342 0.837438 0.238697
CON U[11]= 0.006371 0.006137 0.007362 -0.001044 0.002787 -0.001128
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
ATOM ALP3 8.000000 0.031883 0.000000 0.549342 0.837438 0.238697
CON U[11]= 0.006371 0.006137 0.007362 -0.001044 0.002787 -0.001128
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
```

```

ATOM MGP2  9.000000  0.747691  0.000000  0.250428  0.654596  0.231772
CON U[11]=  0.007858  0.006802  0.007508  0.000453  0.002528  0.000155
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP2  9.000000  0.224271  0.000000  0.250428  0.654596  0.231772
CON U[11]=  0.007858  0.006802  0.007508  0.000453  0.002528  0.000155
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP3  9.000000  0.014664  0.000000  0.250428  0.654596  0.231772
CON U[11]=  0.007858  0.006802  0.007508  0.000453  0.002528  0.000155
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250428  0.654596  0.231772
CON U[11]=  0.007858  0.006802  0.007508  0.000453  0.002528  0.000155
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250428  0.654596  0.231772
CON U[11]=  0.007858  0.006802  0.007508  0.000453  0.002528  0.000155
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010137  0.000000  0.250428  0.654596  0.231772
CON U[11]=  0.007858  0.006802  0.007508  0.000453  0.002528  0.000155
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.003238  0.000000  0.250428  0.654596  0.231772
CON U[11]=  0.007858  0.006802  0.007508  0.000453  0.002528  0.000155
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.172326  0.000000  0.255218  0.016478  0.227696
CON U[11]=  0.009708  0.010333  0.006363  0.000283  0.000529  0.001827
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.607898  0.000000  0.255218  0.016478  0.227696
CON U[11]=  0.009708  0.010333  0.006363  0.000283  0.000529  0.001827
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.051958  0.000000  0.255218  0.016478  0.227696
CON U[11]=  0.009708  0.010333  0.006363  0.000283  0.000529  0.001827
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025451  0.000000  0.255218  0.016478  0.227696
CON U[11]=  0.009708  0.010333  0.006363  0.000283  0.000529  0.001827
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.003054  0.000000  0.255218  0.016478  0.227696
CON U[11]=  0.009708  0.010333  0.006363  0.000283  0.000529  0.001827
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.139314  1.000000  0.254562  0.047268  0.248565
CON U[11]=  0.011757  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
END
PIG BTS-308 N.35 700°C 180 min
#
#LIST  5
READ NATOM =  30, NLAYER =  0, NELEMENT =  0, NBATCH =  0
OVERALL  0.588096  0.050000  0.050000  1.000000  0.000000  31.7530918
ATOM O    1.000000  0.500000  0.000000  0.867667  0.338266  0.168693
CON U[11]=  0.006293  0.009690  0.009530 -0.000121  0.002598  0.000169
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  1.000000  0.500000  0.000000  0.867667  0.338266  0.168693
CON U[11]=  0.006293  0.009690  0.009530 -0.000121  0.002598  0.000169
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    2.000000  0.500000  0.000000  0.373565  0.836737  0.134946
CON U[11]=  0.006686  0.010016  0.009752 -0.000155  0.002934  0.000308
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0

```

ATOM OM2	2.000000	0.500000	0.000000	0.373565	0.836737	0.134946
CON U[11]=	0.006686	0.010016	0.009752	-0.000155	0.002934	0.000308
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	3.000000	0.500000	0.000000	0.121643	0.499462	0.332212
CON U[11]=	0.012349	0.008383	0.013377	-0.001524	0.005939	-0.003436
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	3.000000	0.500000	0.000000	0.121643	0.499462	0.332212
CON U[11]=	0.012349	0.008383	0.013377	-0.001524	0.005939	-0.003436
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	4.000000	0.500000	0.000000	0.628868	0.987549	0.372735
CON U[11]=	0.014488	0.012129	0.020540	-0.007374	0.009888	-0.006129
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	4.000000	0.500000	0.000000	0.628868	0.987549	0.372735
CON U[11]=	0.014488	0.012129	0.020540	-0.007374	0.009888	-0.006129
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	5.000000	0.500000	0.000000	0.104209	0.261339	0.576959
CON U[11]=	0.008991	0.022984	0.020842	0.014267	0.004324	0.000175
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104209	0.261339	0.576959
CON U[11]=	0.008991	0.022984	0.020842	0.014267	0.004324	0.000175
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604797	0.709114	0.480957
CON U[11]=	0.007608	0.020099	0.013260	0.007769	0.003315	0.000545
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604797	0.709114	0.480957
CON U[11]=	0.007608	0.020099	0.013260	0.007769	0.003315	0.000545
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042746	0.340562	0.276437
CON U[11]=	0.005960	0.006456	0.009956	-0.000616	0.003367	-0.000531
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042746	0.340562	0.276437
CON U[11]=	0.005960	0.006456	0.009956	-0.000616	0.003367	-0.000531
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.483938	0.000000	0.549357	0.837462	0.238645
CON U[11]=	0.006297	0.006404	0.007609	-0.000919	0.002785	-0.001043
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.483938	0.000000	0.549357	0.837462	0.238645
CON U[11]=	0.006297	0.006404	0.007609	-0.000919	0.002785	-0.001043
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032125	0.000000	0.549357	0.837462	0.238645
CON U[11]=	0.006297	0.006404	0.007609	-0.000919	0.002785	-0.001043
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.742166	0.000000	0.250422	0.654596	0.231771
CON U[11]=	0.007884	0.007029	0.007589	0.000387	0.002520	0.000109
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.229397	0.000000	0.250422	0.654596	0.231771
CON U[11]=	0.007884	0.007029	0.007589	0.000387	0.002520	0.000109
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.015113	0.000000	0.250422	0.654596	0.231771
CON U[11]=	0.007884	0.007029	0.007589	0.000387	0.002520	0.000109
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250422	0.654596	0.231771
CON U[11]=	0.007884	0.007029	0.007589	0.000387	0.002520	0.000109
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250422  0.654596  0.231771
CON U[11]= 0.007884  0.007029  0.007589  0.000387  0.002520  0.000109
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
ATOM TIP4  9.000000  0.009984  0.000000  0.250422  0.654596  0.231771
CON U[11]= 0.007884  0.007029  0.007589  0.000387  0.002520  0.000109
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
ATOM MNP2  9.000000  0.003340  0.000000  0.250422  0.654596  0.231771
CON U[11]= 0.007884  0.007029  0.007589  0.000387  0.002520  0.000109
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
ATOM MGP2 10.000000  0.174678  0.000000  0.255249  0.016692  0.227866
CON U[11]= 0.009799  0.011062  0.006727  0.000315  0.000542  0.001828
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
ATOM FEP2 10.000000  0.606072  0.000000  0.255249  0.016692  0.227866
CON U[11]= 0.009799  0.011062  0.006727  0.000315  0.000542  0.001828
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
ATOM CAP2 10.000000  0.064926  0.000000  0.255249  0.016692  0.227866
CON U[11]= 0.009799  0.011062  0.006727  0.000315  0.000542  0.001828
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
ATOM MNP2 10.000000  0.025589  0.000000  0.255249  0.016692  0.227866
CON U[11]= 0.009799  0.011062  0.006727  0.000315  0.000542  0.001828
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
ATOM NAP1 10.000000  0.002956  0.000000  0.255249  0.016692  0.227866
CON U[11]= 0.009799  0.011062  0.006727  0.000315  0.000542  0.001828
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
ATOM CAP2 11.000000  0.125779  1.000000  0.254329  0.048960  0.250055
CON U[11]= 0.011687  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00    0  29360128    0
END

```

PIG BTS-308 N.35 700°C 300 min

#

#LIST 5

```

READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.600530 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 24.1742554
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867640 0.338338 0.168987
CON U[11]= 0.006492 0.009428 0.009489 0.000099 0.002779 0.000501
CON SPARE=   1.00    0  25165824    0
ATOM OM2 1.000000 0.500000 0.000000 0.867640 0.338338 0.168987
CON U[11]= 0.006492 0.009428 0.009489 0.000099 0.002779 0.000501
CON SPARE=   1.00    0  25165824    0
ATOM O 2.000000 0.500000 0.000000 0.373585 0.836742 0.135055
CON U[11]= 0.006845 0.009799 0.009685 -0.000020 0.003137 0.000519
CON SPARE=   1.00    0  25165824    0
ATOM OM2 2.000000 0.500000 0.000000 0.373585 0.836742 0.135055
CON U[11]= 0.006845 0.009799 0.009685 -0.000020 0.003137 0.000519
CON SPARE=   1.00    0  25165824    0
ATOM O 3.000000 0.500000 0.000000 0.121609 0.499437 0.332027
CON U[11]= 0.012699 0.008401 0.013336 -0.001534 0.006551 -0.003375
CON SPARE=   1.00    0  25165824    0
ATOM OM2 3.000000 0.500000 0.000000 0.121609 0.499437 0.332027
CON U[11]= 0.012699 0.008401 0.013336 -0.001534 0.006551 -0.003375
CON SPARE=   1.00    0  25165824    0
ATOM O 4.000000 0.500000 0.000000 0.628848 0.987704 0.372461
CON U[11]= 0.014272 0.011683 0.021332 -0.007316 0.010477 -0.005924
CON SPARE=   1.00    0  25165824    0

```

ATOM OM2	4.000000	0.500000	0.000000	0.628848	0.987704	0.372461
CON U[11]=	0.014272	0.011683	0.021332	-0.007316	0.010477	-0.005924
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	5.000000	0.500000	0.000000	0.104203	0.261567	0.577308
CON U[11]=	0.008604	0.022278	0.020530	0.013345	0.003972	0.000670
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104203	0.261567	0.577308
CON U[11]=	0.008604	0.022278	0.020530	0.013345	0.003972	0.000670
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604845	0.709141	0.481014
CON U[11]=	0.007354	0.020400	0.013417	0.007870	0.003278	0.000560
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604845	0.709141	0.481014
CON U[11]=	0.007354	0.020400	0.013417	0.007870	0.003278	0.000560
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042799	0.340555	0.276478
CON U[11]=	0.005848	0.006358	0.009848	-0.000675	0.003459	-0.000585
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042799	0.340555	0.276478
CON U[11]=	0.005848	0.006358	0.009848	-0.000675	0.003459	-0.000585
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.483989	0.000000	0.549339	0.837435	0.238611
CON U[11]=	0.006265	0.006257	0.007571	-0.001079	0.002834	-0.001127
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.483989	0.000000	0.549339	0.837435	0.238611
CON U[11]=	0.006265	0.006257	0.007571	-0.001079	0.002834	-0.001127
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032021	0.000000	0.549339	0.837435	0.238611
CON U[11]=	0.006265	0.006257	0.007571	-0.001079	0.002834	-0.001127
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.740925	0.000000	0.250400	0.654595	0.231763
CON U[11]=	0.007802	0.006714	0.007586	0.000437	0.002519	0.000116
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.230733	0.000000	0.250400	0.654595	0.231763
CON U[11]=	0.007802	0.006714	0.007586	0.000437	0.002519	0.000116
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014959	0.000000	0.250400	0.654595	0.231763
CON U[11]=	0.007802	0.006714	0.007586	0.000437	0.002519	0.000116
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250400	0.654595	0.231763
CON U[11]=	0.007802	0.006714	0.007586	0.000437	0.002519	0.000116
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250400	0.654595	0.231763
CON U[11]=	0.007802	0.006714	0.007586	0.000437	0.002519	0.000116
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010019	0.000000	0.250400	0.654595	0.231763
CON U[11]=	0.007802	0.006714	0.007586	0.000437	0.002519	0.000116
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003365	0.000000	0.250400	0.654595	0.231763
CON U[11]=	0.007802	0.006714	0.007586	0.000437	0.002519	0.000116
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.176399	0.000000	0.255246	0.016737	0.227822
CON U[11]=	0.009655	0.010884	0.006616	0.000504	0.000551	0.001822
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM FEP2  10.000000  0.604145  0.000000  0.255246  0.016737  0.227822
CON U[11]=  0.009655  0.010884  0.006616  0.000504  0.000551  0.001822
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2  10.000000  0.064784  0.000000  0.255246  0.016737  0.227822
CON U[11]=  0.009655  0.010884  0.006616  0.000504  0.000551  0.001822
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2  10.000000  0.025549  0.000000  0.255246  0.016737  0.227822
CON U[11]=  0.009655  0.010884  0.006616  0.000504  0.000551  0.001822
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1  10.000000  0.002975  0.000000  0.255246  0.016737  0.227822
CON U[11]=  0.009655  0.010884  0.006616  0.000504  0.000551  0.001822
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2  11.000000  0.126149  1.000000  0.254252  0.048788  0.249332
CON U[11]=  0.012530  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
END

```

PIG BTS-308 N.35 700°C 600 min

#

#LIST 5

```

READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL  0.599337  0.050000  0.050000  1.000000  0.000000  27.7130032
ATOM O    1.000000  0.500000  0.000000  0.867749  0.338298  0.168910
CON U[11]=  0.006141  0.009499  0.009864  -0.000191  0.002477  0.000130
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  1.000000  0.500000  0.000000  0.867749  0.338298  0.168910
CON U[11]=  0.006141  0.009499  0.009864  -0.000191  0.002477  0.000130
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    2.000000  0.500000  0.000000  0.373811  0.836743  0.134997
CON U[11]=  0.006923  0.009367  0.010093  0.000057  0.002885  0.000346
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  2.000000  0.500000  0.000000  0.373811  0.836743  0.134997
CON U[11]=  0.006923  0.009367  0.010093  0.000057  0.002885  0.000346
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    3.000000  0.500000  0.000000  0.121573  0.499395  0.331973
CON U[11]=  0.012475  0.008450  0.013546  -0.001391  0.006044  -0.003280
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  3.000000  0.500000  0.000000  0.121573  0.499395  0.331973
CON U[11]=  0.012475  0.008450  0.013546  -0.001391  0.006044  -0.003280
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    4.000000  0.500000  0.000000  0.628683  0.987534  0.372746
CON U[11]=  0.014223  0.011263  0.021445  -0.007605  0.009830  -0.005741
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  4.000000  0.500000  0.000000  0.628683  0.987534  0.372746
CON U[11]=  0.014223  0.011263  0.021445  -0.007605  0.009830  -0.005741
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    5.000000  0.500000  0.000000  0.104248  0.261293  0.576855
CON U[11]=  0.007737  0.022722  0.021223  0.013731  0.004022  0.000510
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  5.000000  0.500000  0.000000  0.104248  0.261293  0.576855
CON U[11]=  0.007737  0.022722  0.021223  0.013731  0.004022  0.000510
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O    6.000000  0.500000  0.000000  0.604712  0.709018  0.481196
CON U[11]=  0.007526  0.019375  0.013240  0.007552  0.003244  0.000665
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0

```

ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604712	0.709018	0.481196
CON U[11]=	0.007526	0.019375	0.013240	0.007552	0.003244	0.000665
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042757	0.340551	0.276543
CON U[11]=	0.005864	0.006267	0.010062	-0.000721	0.003261	-0.000568
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042757	0.340551	0.276543
CON U[11]=	0.005864	0.006267	0.010062	-0.000721	0.003261	-0.000568
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.484018	0.000000	0.549410	0.837400	0.238606
CON U[11]=	0.006155	0.006282	0.007724	-0.000977	0.002557	-0.001111
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.484018	0.000000	0.549410	0.837400	0.238606
CON U[11]=	0.006155	0.006282	0.007724	-0.000977	0.002557	-0.001111
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.031964	0.000000	0.549410	0.837400	0.238606
CON U[11]=	0.006155	0.006282	0.007724	-0.000977	0.002557	-0.001111
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.743538	0.000000	0.250428	0.654582	0.231734
CON U[11]=	0.007591	0.006704	0.007556	0.000301	0.002498	0.000036
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.228266	0.000000	0.250428	0.654582	0.231734
CON U[11]=	0.007591	0.006704	0.007556	0.000301	0.002498	0.000036
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014786	0.000000	0.250428	0.654582	0.231734
CON U[11]=	0.007591	0.006704	0.007556	0.000301	0.002498	0.000036
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250428	0.654582	0.231734
CON U[11]=	0.007591	0.006704	0.007556	0.000301	0.002498	0.000036
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250428	0.654582	0.231734
CON U[11]=	0.007591	0.006704	0.007556	0.000301	0.002498	0.000036
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010093	0.000000	0.250428	0.654582	0.231734
CON U[11]=	0.007591	0.006704	0.007556	0.000301	0.002498	0.000036
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003317	0.000000	0.250428	0.654582	0.231734
CON U[11]=	0.007591	0.006704	0.007556	0.000301	0.002498	0.000036
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.175019	0.000000	0.255246	0.016629	0.227672
CON U[11]=	0.009791	0.010907	0.006719	0.000379	0.000628	0.001970
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	10.000000	0.605140	0.000000	0.255246	0.016629	0.227672
CON U[11]=	0.009791	0.010907	0.006719	0.000379	0.000628	0.001970
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	10.000000	0.059916	0.000000	0.255246	0.016629	0.227672
CON U[11]=	0.009791	0.010907	0.006719	0.000379	0.000628	0.001970
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	10.000000	0.025502	0.000000	0.255246	0.016629	0.227672
CON U[11]=	0.009791	0.010907	0.006719	0.000379	0.000628	0.001970
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM NAP1	10.000000	0.003008	0.000000	0.255246	0.016629	0.227672
CON U[11]=	0.009791	0.010907	0.006719	0.000379	0.000628	0.001970
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		


```

ATOM CAP2  11.000000  0.131415  1.000000  0.254291  0.048103  0.250414
CON U[11]=  0.012696  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
END
PIG BTS-308 N.35 700°C 1000 min
#
#LIST  5
READ NATOM =   30, NLAYER =   0, NELEMENT =   0, NBATCH =   0
OVERALL  0.588393 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 26.9510784
ATOM O    1.000000 0.500000 0.000000 0.867648 0.338300 0.168847
CON U[11]= 0.006029 0.009377 0.009442 0.000063 0.002463 0.000334
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  1.000000 0.500000 0.000000 0.867648 0.338300 0.168847
CON U[11]= 0.006029 0.009377 0.009442 0.000063 0.002463 0.000334
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O    2.000000 0.500000 0.000000 0.373639 0.836709 0.134962
CON U[11]= 0.006738 0.009749 0.009928 -0.000112 0.003030 0.000549
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  2.000000 0.500000 0.000000 0.373639 0.836709 0.134962
CON U[11]= 0.006738 0.009749 0.009928 -0.000112 0.003030 0.000549
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O    3.000000 0.500000 0.000000 0.121596 0.499616 0.332059
CON U[11]= 0.012632 0.008385 0.013071 -0.001322 0.006160 -0.003162
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  3.000000 0.500000 0.000000 0.121596 0.499616 0.332059
CON U[11]= 0.012632 0.008385 0.013071 -0.001322 0.006160 -0.003162
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O    4.000000 0.500000 0.000000 0.628751 0.987649 0.372776
CON U[11]= 0.014377 0.011532 0.021460 -0.007732 0.010293 -0.006043
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  4.000000 0.500000 0.000000 0.628751 0.987649 0.372776
CON U[11]= 0.014377 0.011532 0.021460 -0.007732 0.010293 -0.006043
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O    5.000000 0.500000 0.000000 0.104169 0.261434 0.576720
CON U[11]= 0.008638 0.023313 0.020832 0.014241 0.004206 0.000541
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  5.000000 0.500000 0.000000 0.104169 0.261434 0.576720
CON U[11]= 0.008638 0.023313 0.020832 0.014241 0.004206 0.000541
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM O    6.000000 0.500000 0.000000 0.604701 0.709058 0.481019
CON U[11]= 0.007732 0.019716 0.013241 0.007698 0.003665 0.000584
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  6.000000 0.500000 0.000000 0.604701 0.709058 0.481019
CON U[11]= 0.007732 0.019716 0.013241 0.007698 0.003665 0.000584
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM SI   7.000000 0.500000 0.000000 0.042802 0.340553 0.276509
CON U[11]= 0.005734 0.006484 0.009946 -0.000624 0.003330 -0.000551
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM SIP4 7.000000 0.500000 0.000000 0.042802 0.340553 0.276509
CON U[11]= 0.005734 0.006484 0.009946 -0.000624 0.003330 -0.000551
CON SPARE=   1.00      0 25165824      0
ATOM SI   8.000000 0.483976 0.000000 0.549416 0.837410 0.238584
CON U[11]= 0.006182 0.006322 0.007584 -0.000970 0.002679 -0.001129
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0

```

ATOM SIP4	8.000000	0.483976	0.000000	0.549416	0.837410	0.238584
CON U[11]=	0.006182	0.006322	0.007584	-0.000970	0.002679	-0.001129
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032047	0.000000	0.549416	0.837410	0.238584
CON U[11]=	0.006182	0.006322	0.007584	-0.000970	0.002679	-0.001129
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.740241	0.000000	0.250406	0.654596	0.231746
CON U[11]=	0.007746	0.006860	0.007583	0.000311	0.002480	0.000090
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.231386	0.000000	0.250406	0.654596	0.231746
CON U[11]=	0.007746	0.006860	0.007583	0.000311	0.002480	0.000090
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014963	0.000000	0.250406	0.654596	0.231746
CON U[11]=	0.007746	0.006860	0.007583	0.000311	0.002480	0.000090
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250406	0.654596	0.231746
CON U[11]=	0.007746	0.006860	0.007583	0.000311	0.002480	0.000090
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250406	0.654596	0.231746
CON U[11]=	0.007746	0.006860	0.007583	0.000311	0.002480	0.000090
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010030	0.000000	0.250406	0.654596	0.231746
CON U[11]=	0.007746	0.006860	0.007583	0.000311	0.002480	0.000090
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003381	0.000000	0.250406	0.654596	0.231746
CON U[11]=	0.007746	0.006860	0.007583	0.000311	0.002480	0.000090
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.176910	0.000000	0.255246	0.016535	0.227706
CON U[11]=	0.009881	0.010860	0.006728	0.000389	0.000657	0.001834
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	10.000000	0.603537	0.000000	0.255246	0.016535	0.227706
CON U[11]=	0.009881	0.010860	0.006728	0.000389	0.000657	0.001834
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	10.000000	0.061554	0.000000	0.255246	0.016535	0.227706
CON U[11]=	0.009881	0.010860	0.006728	0.000389	0.000657	0.001834
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	10.000000	0.025574	0.000000	0.255246	0.016535	0.227706
CON U[11]=	0.009881	0.010860	0.006728	0.000389	0.000657	0.001834
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM NAP1	10.000000	0.002975	0.000000	0.255246	0.016535	0.227706
CON U[11]=	0.009881	0.010860	0.006728	0.000389	0.000657	0.001834
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	11.000000	0.129449	1.000000	0.254276	0.048296	0.248469
CON U[11]=	0.011217	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

END

