

Table 5d. Site occupancies, atomic positions and anisotropic displacement parameters of crystal N.13 after annealing at 750°C.

PIG BTS-308 N.13 750°C 9 min

#

#LIST 5

```

READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.600750 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 31.5201988
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867560 0.338272 0.169183
CON U[11]= 0.006893 0.009713 0.009155 -0.000276 0.002802 0.000201
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 1.000000 0.500000 0.000000 0.867560 0.338272 0.169183
CON U[11]= 0.006893 0.009713 0.009155 -0.000276 0.002802 0.000201
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 2.000000 0.500000 0.000000 0.373548 0.836715 0.134465
CON U[11]= 0.007051 0.009972 0.009633 -0.000168 0.002988 0.000398
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 2.000000 0.500000 0.000000 0.373548 0.836715 0.134465
CON U[11]= 0.007051 0.009972 0.009633 -0.000168 0.002988 0.000398
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 3.000000 0.500000 0.000000 0.121725 0.499367 0.331784
CON U[11]= 0.012955 0.008593 0.013594 -0.001405 0.006479 -0.003590
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 3.000000 0.500000 0.000000 0.121725 0.499367 0.331784
CON U[11]= 0.012955 0.008593 0.013594 -0.001405 0.006479 -0.003590
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 4.000000 0.500000 0.000000 0.629062 0.987312 0.372932
CON U[11]= 0.014249 0.012329 0.020598 -0.007271 0.009906 -0.005805
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 4.000000 0.500000 0.000000 0.629062 0.987312 0.372932
CON U[11]= 0.014249 0.012329 0.020598 -0.007271 0.009906 -0.005805
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 5.000000 0.500000 0.000000 0.104015 0.262078 0.578104
CON U[11]= 0.008426 0.022430 0.020490 0.013388 0.004085 0.000198
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 5.000000 0.500000 0.000000 0.104015 0.262078 0.578104
CON U[11]= 0.008426 0.022430 0.020490 0.013388 0.004085 0.000198
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 6.000000 0.500000 0.000000 0.604799 0.708806 0.480798
CON U[11]= 0.007915 0.019111 0.013706 0.007400 0.003154 0.000425
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 6.000000 0.500000 0.000000 0.604799 0.708806 0.480798
CON U[11]= 0.007915 0.019111 0.013706 0.007400 0.003154 0.000425
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 7.000000 0.500000 0.000000 0.042781 0.340544 0.276939
CON U[11]= 0.006008 0.006603 0.009983 -0.000685 0.003388 -0.000481
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SIP4 7.000000 0.500000 0.000000 0.042781 0.340544 0.276939
CON U[11]= 0.006008 0.006603 0.009983 -0.000685 0.003388 -0.000481
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 8.000000 0.483983 0.000000 0.549499 0.837407 0.238443
CON U[11]= 0.006311 0.006519 0.007882 -0.000861 0.002816 -0.001010
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0

```

```

ATOM SIP4  8.000000  0.483983  0.000000  0.549499  0.837407  0.238443
CON U[11]= 0.006311  0.006519  0.007882 -0.000861  0.002816 -0.001010
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  8.000000  0.032033  0.000000  0.549499  0.837407  0.238443
CON U[11]= 0.006311  0.006519  0.007882 -0.000861  0.002816 -0.001010
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2  9.000000  0.742640  0.000000  0.250472  0.654568  0.231437
CON U[11]= 0.008038  0.007402  0.007742  0.000412  0.002435  0.000081
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2  9.000000  0.229077  0.000000  0.250472  0.654568  0.231437
CON U[11]= 0.008038  0.007402  0.007742  0.000412  0.002435  0.000081
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM FEP3  9.000000  0.014912  0.000000  0.250472  0.654568  0.231437
CON U[11]= 0.008038  0.007402  0.007742  0.000412  0.002435  0.000081
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250472  0.654568  0.231437
CON U[11]= 0.008038  0.007402  0.007742  0.000412  0.002435  0.000081
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250472  0.654568  0.231437
CON U[11]= 0.008038  0.007402  0.007742  0.000412  0.002435  0.000081
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010028  0.000000  0.250472  0.654568  0.231437
CON U[11]= 0.008038  0.007402  0.007742  0.000412  0.002435  0.000081
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.003342  0.000000  0.250472  0.654568  0.231437
CON U[11]= 0.008038  0.007402  0.007742  0.000412  0.002435  0.000081
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.173807  0.000000  0.255386  0.016861  0.227773
CON U[11]= 0.009888  0.011298  0.006892  0.000573  0.000550  0.001875
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.606734  0.000000  0.255386  0.016861  0.227773
CON U[11]= 0.009888  0.011298  0.006892  0.000573  0.000550  0.001875
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.079205  0.000000  0.255386  0.016861  0.227773
CON U[11]= 0.009888  0.011298  0.006892  0.000573  0.000550  0.001875
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025673  0.000000  0.255386  0.016861  0.227773
CON U[11]= 0.009888  0.011298  0.006892  0.000573  0.000550  0.001875
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.002935  0.000000  0.255386  0.016861  0.227773
CON U[11]= 0.009888  0.011298  0.006892  0.000573  0.000550  0.001875
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.111646  1.000000  0.253983  0.049861  0.249172
CON U[11]= 0.011967  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
END
PIG BTS-308 N.13 750°C 15 min
#
#LIST 5
READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.600809 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 31.5485382
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867569 0.338344 0.169231
CON U[11]= 0.006948 0.009497 0.009704 -0.000118 0.002950 0.000215
CON SPARE= 1.00      0 25165824      0

```

ATOM OM2	1.000000	0.500000	0.000000	0.867569	0.338344	0.169231
CON U[11]=	0.006948	0.009497	0.009704	-0.000118	0.002950	0.000215
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	2.000000	0.500000	0.000000	0.373623	0.836731	0.134554
CON U[11]=	0.007438	0.009877	0.010243	-0.000143	0.003324	0.000308
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	2.000000	0.500000	0.000000	0.373623	0.836731	0.134554
CON U[11]=	0.007438	0.009877	0.010243	-0.000143	0.003324	0.000308
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	3.000000	0.500000	0.000000	0.121805	0.499435	0.331915
CON U[11]=	0.013088	0.008483	0.013538	-0.001465	0.006236	-0.003161
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	3.000000	0.500000	0.000000	0.121805	0.499435	0.331915
CON U[11]=	0.013088	0.008483	0.013538	-0.001465	0.006236	-0.003161
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	4.000000	0.500000	0.000000	0.629058	0.987268	0.373140
CON U[11]=	0.014229	0.012135	0.020847	-0.007278	0.009569	-0.005885
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	4.000000	0.500000	0.000000	0.629058	0.987268	0.373140
CON U[11]=	0.014229	0.012135	0.020847	-0.007278	0.009569	-0.005885
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	5.000000	0.500000	0.000000	0.104015	0.261724	0.577531
CON U[11]=	0.008534	0.021421	0.021151	0.013361	0.004146	0.000509
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104015	0.261724	0.577531
CON U[11]=	0.008534	0.021421	0.021151	0.013361	0.004146	0.000509
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604826	0.709132	0.480646
CON U[11]=	0.007849	0.019519	0.013338	0.007327	0.003296	0.000240
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604826	0.709132	0.480646
CON U[11]=	0.007849	0.019519	0.013338	0.007327	0.003296	0.000240
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042730	0.340529	0.276987
CON U[11]=	0.006270	0.006402	0.010099	-0.000652	0.003713	-0.000466
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042730	0.340529	0.276987
CON U[11]=	0.006270	0.006402	0.010099	-0.000652	0.003713	-0.000466
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.484025	0.000000	0.549506	0.837414	0.238500
CON U[11]=	0.006515	0.006273	0.008035	-0.000871	0.002964	-0.000936
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.484025	0.000000	0.549506	0.837414	0.238500
CON U[11]=	0.006515	0.006273	0.008035	-0.000871	0.002964	-0.000936
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.031951	0.000000	0.549506	0.837414	0.238500
CON U[11]=	0.006515	0.006273	0.008035	-0.000871	0.002964	-0.000936
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.742712	0.000000	0.250485	0.654544	0.231401
CON U[11]=	0.008019	0.006922	0.007716	0.000391	0.002658	0.000121
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.229075	0.000000	0.250485	0.654544	0.231401
CON U[11]=	0.008019	0.006922	0.007716	0.000391	0.002658	0.000121
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM FEP3  9.000000  0.014777  0.000000  0.250485  0.654544  0.231401
CON U[11]= 0.008019  0.006922  0.007716  0.000391  0.002658  0.000121
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250485  0.654544  0.231401
CON U[11]= 0.008019  0.006922  0.007716  0.000391  0.002658  0.000121
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250485  0.654544  0.231401
CON U[11]= 0.008019  0.006922  0.007716  0.000391  0.002658  0.000121
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010108  0.000000  0.250485  0.654544  0.231401
CON U[11]= 0.008019  0.006922  0.007716  0.000391  0.002658  0.000121
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.003329  0.000000  0.250485  0.654544  0.231401
CON U[11]= 0.008019  0.006922  0.007716  0.000391  0.002658  0.000121
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.176606  0.000000  0.255352  0.016884  0.227763
CON U[11]= 0.010160  0.011325  0.007292  0.000549  0.000861  0.001776
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.603510  0.000000  0.255352  0.016884  0.227763
CON U[11]= 0.010160  0.011325  0.007292  0.000549  0.000861  0.001776
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.085378  0.000000  0.255352  0.016884  0.227763
CON U[11]= 0.010160  0.011325  0.007292  0.000549  0.000861  0.001776
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025431  0.000000  0.255352  0.016884  0.227763
CON U[11]= 0.010160  0.011325  0.007292  0.000549  0.000861  0.001776
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.003042  0.000000  0.255352  0.016884  0.227763
CON U[11]= 0.010160  0.011325  0.007292  0.000549  0.000861  0.001776
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.106033  1.000000  0.254228  0.050635  0.249672
CON U[11]= 0.010891  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=  1.00      0 29360128      0
END
PIG BTS-308 N.13 750°C 25 min
#
#LIST  5
READ NATOM =  30, NLAYER =  0, NELEMENT =  0, NBATCH =  0
OVERALL  0.599237  0.050000  0.050000  1.000000  0.000000  27.9750576
ATOM O    1.000000  0.500000  0.000000  0.867637  0.338348  0.169093
CON U[11]= 0.006772  0.009877  0.009668 -0.000101  0.002454  0.000102
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  1.000000  0.500000  0.000000  0.867637  0.338348  0.169093
CON U[11]= 0.006772  0.009877  0.009668 -0.000101  0.002454  0.000102
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0
ATOM O    2.000000  0.500000  0.000000  0.373669  0.836715  0.134376
CON U[11]= 0.006945  0.010397  0.009739 -0.000251  0.002994  0.000434
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0
ATOM OM2  2.000000  0.500000  0.000000  0.373669  0.836715  0.134376
CON U[11]= 0.006945  0.010397  0.009739 -0.000251  0.002994  0.000434
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0
ATOM O    3.000000  0.500000  0.000000  0.121619  0.499310  0.331960
CON U[11]= 0.012958  0.008570  0.013053 -0.001390  0.006049 -0.003038
CON SPARE=  1.00      0 25165824      0

```

ATOM OM2	3.000000	0.500000	0.000000	0.121619	0.499310	0.331960
CON U[11]=	0.012958	0.008570	0.013053	-0.001390	0.006049	-0.003038
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	4.000000	0.500000	0.000000	0.629019	0.987257	0.373130
CON U[11]=	0.014413	0.012079	0.020820	-0.007376	0.010095	-0.005423
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	4.000000	0.500000	0.000000	0.629019	0.987257	0.373130
CON U[11]=	0.014413	0.012079	0.020820	-0.007376	0.010095	-0.005423
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	5.000000	0.500000	0.000000	0.104192	0.261874	0.577904
CON U[11]=	0.008636	0.022006	0.020389	0.013121	0.004432	0.000708
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104192	0.261874	0.577904
CON U[11]=	0.008636	0.022006	0.020389	0.013121	0.004432	0.000708
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604865	0.709118	0.480576
CON U[11]=	0.007414	0.019925	0.013782	0.007893	0.002983	0.000533
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604865	0.709118	0.480576
CON U[11]=	0.007414	0.019925	0.013782	0.007893	0.002983	0.000533
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042783	0.340542	0.277152
CON U[11]=	0.006036	0.006595	0.010076	-0.000719	0.003321	-0.000511
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042783	0.340542	0.277152
CON U[11]=	0.006036	0.006595	0.010076	-0.000719	0.003321	-0.000511
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.484028	0.000000	0.549492	0.837440	0.238445
CON U[11]=	0.006405	0.006396	0.007766	-0.000951	0.002780	-0.001012
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.484028	0.000000	0.549492	0.837440	0.238445
CON U[11]=	0.006405	0.006396	0.007766	-0.000951	0.002780	-0.001012
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.031943	0.000000	0.549492	0.837440	0.238445
CON U[11]=	0.006405	0.006396	0.007766	-0.000951	0.002780	-0.001012
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.737836	0.000000	0.250453	0.654551	0.231361
CON U[11]=	0.008041	0.007175	0.007714	0.000422	0.002570	0.000087
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.233900	0.000000	0.250453	0.654551	0.231361
CON U[11]=	0.008041	0.007175	0.007714	0.000422	0.002570	0.000087
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014752	0.000000	0.250453	0.654551	0.231361
CON U[11]=	0.008041	0.007175	0.007714	0.000422	0.002570	0.000087
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250453	0.654551	0.231361
CON U[11]=	0.008041	0.007175	0.007714	0.000422	0.002570	0.000087
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250453	0.654551	0.231361
CON U[11]=	0.008041	0.007175	0.007714	0.000422	0.002570	0.000087
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010098	0.000000	0.250453	0.654551	0.231361
CON U[11]=	0.008041	0.007175	0.007714	0.000422	0.002570	0.000087
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM MNP2  9.000000  0.003413  0.000000  0.250453  0.654551  0.231361
CON U[11]=  0.008041  0.007175  0.007714  0.000422  0.002570  0.000087
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.180912  0.000000  0.255343  0.017083  0.227875
CON U[11]=  0.009868  0.011695  0.007013  0.000707  0.000697  0.001897
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.599839  0.000000  0.255343  0.017083  0.227875
CON U[11]=  0.009868  0.011695  0.007013  0.000707  0.000697  0.001897
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.091797  0.000000  0.255343  0.017083  0.227875
CON U[11]=  0.009868  0.011695  0.007013  0.000707  0.000697  0.001897
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025384  0.000000  0.255343  0.017083  0.227875
CON U[11]=  0.009868  0.011695  0.007013  0.000707  0.000697  0.001897
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.003006  0.000000  0.255343  0.017083  0.227875
CON U[11]=  0.009868  0.011695  0.007013  0.000707  0.000697  0.001897
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.099062  1.000000  0.253806  0.052197  0.250425
CON U[11]=  0.012219  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
END

```

PIG BTS-308 N.13 750°C 50 min

#

#LIST 5

```

READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL  0.590376  0.050000  0.050000  1.000000  0.000000  28.4485912
ATOM O    1.000000  0.500000  0.000000  0.867664  0.338357  0.169539
CON U[11]=  0.007044  0.009817  0.009801 -0.000162  0.002751  0.000191
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   1.000000  0.500000  0.000000  0.867664  0.338357  0.169539
CON U[11]=  0.007044  0.009817  0.009801 -0.000162  0.002751  0.000191
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     2.000000  0.500000  0.000000  0.373889  0.836792  0.134805
CON U[11]=  0.007349  0.010502  0.009671 -0.000258  0.002998  0.000214
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   2.000000  0.500000  0.000000  0.373889  0.836792  0.134805
CON U[11]=  0.007349  0.010502  0.009671 -0.000258  0.002998  0.000214
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     3.000000  0.500000  0.000000  0.121695  0.499396  0.331926
CON U[11]=  0.012467  0.008826  0.013610 -0.001246  0.005867 -0.003155
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   3.000000  0.500000  0.000000  0.121695  0.499396  0.331926
CON U[11]=  0.012467  0.008826  0.013610 -0.001246  0.005867 -0.003155
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     4.000000  0.500000  0.000000  0.629044  0.987291  0.373286
CON U[11]=  0.014641  0.012154  0.020885 -0.007235  0.010017 -0.005733
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   4.000000  0.500000  0.000000  0.629044  0.987291  0.373286
CON U[11]=  0.014641  0.012154  0.020885 -0.007235  0.010017 -0.005733
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     5.000000  0.500000  0.000000  0.103940  0.261971  0.578301
CON U[11]=  0.008532  0.022395  0.020475  0.013504  0.004466  0.000785
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0

```

ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.103940	0.261971	0.578301
CON U[11]=	0.008532	0.022395	0.020475	0.013504	0.004466	0.000785
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604797	0.708908	0.480566
CON U[11]=	0.007590	0.020180	0.013441	0.007791	0.003159	0.000519
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604797	0.708908	0.480566
CON U[11]=	0.007590	0.020180	0.013441	0.007791	0.003159	0.000519
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042771	0.340522	0.277198
CON U[11]=	0.006160	0.006592	0.009959	-0.000605	0.003532	-0.000488
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042771	0.340522	0.277198
CON U[11]=	0.006160	0.006592	0.009959	-0.000605	0.003532	-0.000488
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.484001	0.000000	0.549509	0.837405	0.238559
CON U[11]=	0.006617	0.006437	0.007905	-0.000890	0.002763	-0.001008
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.484001	0.000000	0.549509	0.837405	0.238559
CON U[11]=	0.006617	0.006437	0.007905	-0.000890	0.002763	-0.001008
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.031999	0.000000	0.549509	0.837405	0.238559
CON U[11]=	0.006617	0.006437	0.007905	-0.000890	0.002763	-0.001008
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.732303	0.000000	0.250475	0.654558	0.231353
CON U[11]=	0.008199	0.007122	0.007921	0.000401	0.002570	0.000138
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.239262	0.000000	0.250475	0.654558	0.231353
CON U[11]=	0.008199	0.007122	0.007921	0.000401	0.002570	0.000138
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014860	0.000000	0.250475	0.654558	0.231353
CON U[11]=	0.008199	0.007122	0.007921	0.000401	0.002570	0.000138
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250475	0.654558	0.231353
CON U[11]=	0.008199	0.007122	0.007921	0.000401	0.002570	0.000138
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250475	0.654558	0.231353
CON U[11]=	0.008199	0.007122	0.007921	0.000401	0.002570	0.000138
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010057	0.000000	0.250475	0.654558	0.231353
CON U[11]=	0.008199	0.007122	0.007921	0.000401	0.002570	0.000138
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003518	0.000000	0.250475	0.654558	0.231353
CON U[11]=	0.008199	0.007122	0.007921	0.000401	0.002570	0.000138
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.185289	0.000000	0.255397	0.017006	0.227798
CON U[11]=	0.010350	0.011857	0.007178	0.000642	0.000714	0.001838
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	10.000000	0.595326	0.000000	0.255397	0.017006	0.227798
CON U[11]=	0.010350	0.011857	0.007178	0.000642	0.000714	0.001838
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	10.000000	0.090513	0.000000	0.255397	0.017006	0.227798
CON U[11]=	0.010350	0.011857	0.007178	0.000642	0.000714	0.001838
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM MNP2  10.000000  0.025387  0.000000  0.255397  0.017006  0.227798
CON U[11]=  0.010350  0.011857  0.007178  0.000642  0.000714  0.001838
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1  10.000000  0.002976  0.000000  0.255397  0.017006  0.227798
CON U[11]=  0.010350  0.011857  0.007178  0.000642  0.000714  0.001838
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2  11.000000  0.100510  1.000000  0.254139  0.050652  0.250382
CON U[11]=  0.011767  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
END
PIG BTS-308 N.13 750°C 100 min
#
#LIST    5
READ NATOM =   30, NLAYER =   0, NELEMENT =   0, NBATCH =   0
OVERALL  0.596009 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000    29.5989799
ATOM O    1.000000 0.500000 0.000000 0.867713 0.338339 0.169512
CON U[11]= 0.006806 0.009610 0.009625 -0.000050 0.002942 0.000131
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   1.000000 0.500000 0.000000 0.867713 0.338339 0.169512
CON U[11]= 0.006806 0.009610 0.009625 -0.000050 0.002942 0.000131
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     2.000000 0.500000 0.000000 0.373728 0.836778 0.134502
CON U[11]= 0.006996 0.010242 0.009970 -0.000200 0.003045 0.000416
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   2.000000 0.500000 0.000000 0.373728 0.836778 0.134502
CON U[11]= 0.006996 0.010242 0.009970 -0.000200 0.003045 0.000416
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     3.000000 0.500000 0.000000 0.121601 0.499343 0.331794
CON U[11]= 0.013119 0.008838 0.013213 -0.001453 0.006653 -0.003485
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   3.000000 0.500000 0.000000 0.121601 0.499343 0.331794
CON U[11]= 0.013119 0.008838 0.013213 -0.001453 0.006653 -0.003485
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     4.000000 0.500000 0.000000 0.628888 0.987282 0.372944
CON U[11]= 0.014269 0.012262 0.020971 -0.007429 0.010061 -0.005886
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   4.000000 0.500000 0.000000 0.628888 0.987282 0.372944
CON U[11]= 0.014269 0.012262 0.020971 -0.007429 0.010061 -0.005886
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     5.000000 0.500000 0.000000 0.103990 0.262082 0.578175
CON U[11]= 0.008584 0.021332 0.020489 0.012907 0.003929 0.000231
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   5.000000 0.500000 0.000000 0.103990 0.262082 0.578175
CON U[11]= 0.008584 0.021332 0.020489 0.012907 0.003929 0.000231
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     6.000000 0.500000 0.000000 0.604697 0.709102 0.480355
CON U[11]= 0.008074 0.018918 0.013843 0.007726 0.003218 0.000482
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   6.000000 0.500000 0.000000 0.604697 0.709102 0.480355
CON U[11]= 0.008074 0.018918 0.013843 0.007726 0.003218 0.000482
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM SI    7.000000 0.500000 0.000000 0.042806 0.340572 0.277299
CON U[11]= 0.006224 0.006421 0.009968 -0.000661 0.003488 -0.000532
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0

```



ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042806	0.340572	0.277299
CON U[11]=	0.006224	0.006421	0.009968	-0.000661	0.003488	-0.000532
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.483993	0.000000	0.549537	0.837392	0.238408
CON U[11]=	0.006507	0.006317	0.007845	-0.000866	0.002804	-0.001050
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.483993	0.000000	0.549537	0.837392	0.238408
CON U[11]=	0.006507	0.006317	0.007845	-0.000866	0.002804	-0.001050
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032014	0.000000	0.549537	0.837392	0.238408
CON U[11]=	0.006507	0.006317	0.007845	-0.000866	0.002804	-0.001050
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.731383	0.000000	0.250473	0.654505	0.231278
CON U[11]=	0.008074	0.006995	0.007481	0.000376	0.002562	0.000076
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.240158	0.000000	0.250473	0.654505	0.231278
CON U[11]=	0.008074	0.006995	0.007481	0.000376	0.002562	0.000076
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014877	0.000000	0.250473	0.654505	0.231278
CON U[11]=	0.008074	0.006995	0.007481	0.000376	0.002562	0.000076
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250473	0.654505	0.231278
CON U[11]=	0.008074	0.006995	0.007481	0.000376	0.002562	0.000076
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250473	0.654505	0.231278
CON U[11]=	0.008074	0.006995	0.007481	0.000376	0.002562	0.000076
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010025	0.000000	0.250473	0.654505	0.231278
CON U[11]=	0.008074	0.006995	0.007481	0.000376	0.002562	0.000076
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003556	0.000000	0.250473	0.654505	0.231278
CON U[11]=	0.008074	0.006995	0.007481	0.000376	0.002562	0.000076
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.184030	0.000000	0.255430	0.016601	0.227333
CON U[11]=	0.010072	0.010993	0.006725	0.000400	0.000808	0.001990
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	10.000000	0.596235	0.000000	0.255430	0.016601	0.227333
CON U[11]=	0.010072	0.010993	0.006725	0.000400	0.000808	0.001990
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	10.000000	0.058536	0.000000	0.255430	0.016601	0.227333
CON U[11]=	0.010072	0.010993	0.006725	0.000400	0.000808	0.001990
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	10.000000	0.025604	0.000000	0.255430	0.016601	0.227333
CON U[11]=	0.010072	0.010993	0.006725	0.000400	0.000808	0.001990
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM NAP1	10.000000	0.002913	0.000000	0.255430	0.016601	0.227333
CON U[11]=	0.010072	0.010993	0.006725	0.000400	0.000808	0.001990
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	11.000000	0.132683	1.000000	0.254117	0.047268	0.248772
CON U[11]=	0.014292	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

END

PIG BTS-308 N.13 750°C 250 min

#

#LIST 5

```
READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.594426 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 27.0216656
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867607 0.338382 0.169391
CON U[11]= 0.006799 0.009828 0.009211 -0.000182 0.002431 0.000196
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 1.000000 0.500000 0.000000 0.867607 0.338382 0.169391
CON U[11]= 0.006799 0.009828 0.009211 -0.000182 0.002431 0.000196
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 2.000000 0.500000 0.000000 0.373661 0.836811 0.134652
CON U[11]= 0.007207 0.009612 0.010073 -0.000312 0.003052 0.000289
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 2.000000 0.500000 0.000000 0.373661 0.836811 0.134652
CON U[11]= 0.007207 0.009612 0.010073 -0.000312 0.003052 0.000289
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 3.000000 0.500000 0.000000 0.121791 0.499300 0.331729
CON U[11]= 0.013106 0.008417 0.013068 -0.001415 0.006254 -0.003348
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 3.000000 0.500000 0.000000 0.121791 0.499300 0.331729
CON U[11]= 0.013106 0.008417 0.013068 -0.001415 0.006254 -0.003348
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 4.000000 0.500000 0.000000 0.629184 0.987272 0.373287
CON U[11]= 0.015278 0.011497 0.021002 -0.007419 0.010266 -0.006026
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 4.000000 0.500000 0.000000 0.629184 0.987272 0.373287
CON U[11]= 0.015278 0.011497 0.021002 -0.007419 0.010266 -0.006026
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 5.000000 0.500000 0.000000 0.104162 0.262175 0.578144
CON U[11]= 0.009198 0.022251 0.020564 0.013764 0.004081 0.000269
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 5.000000 0.500000 0.000000 0.104162 0.262175 0.578144
CON U[11]= 0.009198 0.022251 0.020564 0.013764 0.004081 0.000269
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 6.000000 0.500000 0.000000 0.604825 0.708772 0.480497
CON U[11]= 0.007975 0.019475 0.013004 0.007564 0.003367 0.000305
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 6.000000 0.500000 0.000000 0.604825 0.708772 0.480497
CON U[11]= 0.007975 0.019475 0.013004 0.007564 0.003367 0.000305
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 7.000000 0.500000 0.000000 0.042780 0.340531 0.277224
CON U[11]= 0.006318 0.006352 0.009809 -0.000611 0.003477 -0.000548
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SIP4 7.000000 0.500000 0.000000 0.042780 0.340531 0.277224
CON U[11]= 0.006318 0.006352 0.009809 -0.000611 0.003477 -0.000548
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 8.000000 0.483990 0.000000 0.549561 0.837388 0.238439
CON U[11]= 0.006602 0.006230 0.007792 -0.000881 0.002750 -0.000950
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
ATOM SIP4 8.000000 0.483990 0.000000 0.549561 0.837388 0.238439
CON U[11]= 0.006602 0.006230 0.007792 -0.000881 0.002750 -0.000950
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
ATOM ALP3 8.000000 0.032019 0.000000 0.549561 0.837388 0.238439
CON U[11]= 0.006602 0.006230 0.007792 -0.000881 0.002750 -0.000950
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
```

```

ATOM MGP2  9.000000  0.729995  0.000000  0.250443  0.654518  0.231293
CON U[11]=  0.008093  0.006802  0.007662  0.000400  0.002403  0.000146
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2  9.000000  0.241536  0.000000  0.250443  0.654518  0.231293
CON U[11]=  0.008093  0.006802  0.007662  0.000400  0.002403  0.000146
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP3  9.000000  0.014840  0.000000  0.250443  0.654518  0.231293
CON U[11]=  0.008093  0.006802  0.007662  0.000400  0.002403  0.000146
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250443  0.654518  0.231293
CON U[11]=  0.008093  0.006802  0.007662  0.000400  0.002403  0.000146
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250443  0.654518  0.231293
CON U[11]=  0.008093  0.006802  0.007662  0.000400  0.002403  0.000146
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010062  0.000000  0.250443  0.654518  0.231293
CON U[11]=  0.008093  0.006802  0.007662  0.000400  0.002403  0.000146
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.003567  0.000000  0.250443  0.654518  0.231293
CON U[11]=  0.008093  0.006802  0.007662  0.000400  0.002403  0.000146
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.186756  0.000000  0.255369  0.016985  0.227765
CON U[11]=  0.010437  0.011529  0.007228  0.000656  0.000694  0.001797
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.593898  0.000000  0.255369  0.016985  0.227765
CON U[11]=  0.010437  0.011529  0.007228  0.000656  0.000694  0.001797
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.093696  0.000000  0.255369  0.016985  0.227765
CON U[11]=  0.010437  0.011529  0.007228  0.000656  0.000694  0.001797
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025438  0.000000  0.255369  0.016985  0.227765
CON U[11]=  0.010437  0.011529  0.007228  0.000656  0.000694  0.001797
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.002945  0.000000  0.255369  0.016985  0.227765
CON U[11]=  0.010437  0.011529  0.007228  0.000656  0.000694  0.001797
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.097267  1.000000  0.254379  0.052024  0.250193
CON U[11]=  0.010276  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
END

```