

Table 5b. Site occupancies, atomic positions and anisotropic displacement parameters of crystals N.35 and N.13 after annealing at 800°C.

PIG BTS-308 N.35 800°C 1.5 min

#

#LIST 5

```

READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.598178 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 23.9869919
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867621 0.338277 0.168936
CON U[11]= 0.006500 0.009321 0.009317 -0.000098 0.002711 0.000444
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 1.000000 0.500000 0.000000 0.867621 0.338277 0.168936
CON U[11]= 0.006500 0.009321 0.009317 -0.000098 0.002711 0.000444
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 2.000000 0.500000 0.000000 0.373618 0.836831 0.134932
CON U[11]= 0.007035 0.010037 0.009367 -0.000015 0.003075 0.000562
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 2.000000 0.500000 0.000000 0.373618 0.836831 0.134932
CON U[11]= 0.007035 0.010037 0.009367 -0.000015 0.003075 0.000562
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 3.000000 0.500000 0.000000 0.121657 0.499355 0.331851
CON U[11]= 0.012517 0.008507 0.012971 -0.001615 0.006001 -0.003232
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 3.000000 0.500000 0.000000 0.121657 0.499355 0.331851
CON U[11]= 0.012517 0.008507 0.012971 -0.001615 0.006001 -0.003232
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 4.000000 0.500000 0.000000 0.628960 0.987386 0.372728
CON U[11]= 0.014403 0.012008 0.020921 -0.007763 0.010055 -0.005888
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 4.000000 0.500000 0.000000 0.628960 0.987386 0.372728
CON U[11]= 0.014403 0.012008 0.020921 -0.007763 0.010055 -0.005888
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 5.000000 0.500000 0.000000 0.104283 0.261634 0.577003
CON U[11]= 0.009026 0.021681 0.020183 0.013801 0.004325 0.000826
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 5.000000 0.500000 0.000000 0.104283 0.261634 0.577003
CON U[11]= 0.009026 0.021681 0.020183 0.013801 0.004325 0.000826
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 6.000000 0.500000 0.000000 0.604900 0.709593 0.481671
CON U[11]= 0.008141 0.019371 0.012865 0.007678 0.003453 0.000731
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 6.000000 0.500000 0.000000 0.604900 0.709593 0.481671
CON U[11]= 0.008141 0.019371 0.012865 0.007678 0.003453 0.000731
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 7.000000 0.500000 0.000000 0.042720 0.340577 0.276584
CON U[11]= 0.005822 0.006021 0.009676 -0.000553 0.003251 -0.000530
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SIP4 7.000000 0.500000 0.000000 0.042720 0.340577 0.276584
CON U[11]= 0.005822 0.006021 0.009676 -0.000553 0.003251 -0.000530
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 8.000000 0.484063 0.000000 0.549353 0.837462 0.238594
CON U[11]= 0.006230 0.006036 0.007511 -0.000962 0.002723 -0.001044
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0

```

```

ATOM SIP4  8.000000  0.484063  0.000000  0.549353  0.837462  0.238594
CON U[11]= 0.006230  0.006036  0.007511 -0.000962  0.002723 -0.001044
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  8.000000  0.031874  0.000000  0.549353  0.837462  0.238594
CON U[11]= 0.006230  0.006036  0.007511 -0.000962  0.002723 -0.001044
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2  9.000000  0.737398  0.000000  0.250411  0.654514  0.231656
CON U[11]= 0.008006  0.006593  0.007304  0.000412  0.002573  0.000143
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2  9.000000  0.234417  0.000000  0.250411  0.654514  0.231656
CON U[11]= 0.008006  0.006593  0.007304  0.000412  0.002573  0.000143
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP3  9.000000  0.014617  0.000000  0.250411  0.654514  0.231656
CON U[11]= 0.008006  0.006593  0.007304  0.000412  0.002573  0.000143
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250411  0.654514  0.231656
CON U[11]= 0.008006  0.006593  0.007304  0.000412  0.002573  0.000143
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250411  0.654514  0.231656
CON U[11]= 0.008006  0.006593  0.007304  0.000412  0.002573  0.000143
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010139  0.000000  0.250411  0.654514  0.231656
CON U[11]= 0.008006  0.006593  0.007304  0.000412  0.002573  0.000143
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.003429  0.000000  0.250411  0.654514  0.231656
CON U[11]= 0.008006  0.006593  0.007304  0.000412  0.002573  0.000143
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.181640  0.000000  0.255357  0.016119  0.227250
CON U[11]= 0.009651  0.009621  0.005785  0.000100  0.000487  0.002122
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.598426  0.000000  0.255357  0.016119  0.227250
CON U[11]= 0.009651  0.009621  0.005785  0.000100  0.000487  0.002122
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.021182  0.000000  0.255357  0.016119  0.227250
CON U[11]= 0.009651  0.009621  0.005785  0.000100  0.000487  0.002122
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025382  0.000000  0.255357  0.016119  0.227250
CON U[11]= 0.009651  0.009621  0.005785  0.000100  0.000487  0.002122
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.003021  0.000000  0.255357  0.016119  0.227250
CON U[11]= 0.009651  0.009621  0.005785  0.000100  0.000487  0.002122
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.170349  1.000000  0.253789  0.045020  0.247902
CON U[11]= 0.013910  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0 29360128      0
END
PIG BTS-308 N.35 800°C 3.5 min
#
#LIST 5
READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.602156 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 29.5950603
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867629 0.338328 0.169180
CON U[11]= 0.006583 0.009559 0.009629 -0.000282 0.002822 0.000355
CON SPARE= 1.00      0 25165824      0

```

ATOM OM2	1.000000	0.500000	0.000000	0.867629	0.338328	0.169180
CON U[11]=	0.006583	0.009559	0.009629	-0.000282	0.002822	0.000355
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	2.000000	0.500000	0.000000	0.373700	0.836787	0.135255
CON U[11]=	0.006841	0.009781	0.010019	-0.000149	0.003251	0.000436
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	2.000000	0.500000	0.000000	0.373700	0.836787	0.135255
CON U[11]=	0.006841	0.009781	0.010019	-0.000149	0.003251	0.000436
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	3.000000	0.500000	0.000000	0.121642	0.499443	0.331902
CON U[11]=	0.012494	0.008765	0.013243	-0.001064	0.006115	-0.003542
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	3.000000	0.500000	0.000000	0.121642	0.499443	0.331902
CON U[11]=	0.012494	0.008765	0.013243	-0.001064	0.006115	-0.003542
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	4.000000	0.500000	0.000000	0.628891	0.987560	0.372624
CON U[11]=	0.014588	0.012100	0.020939	-0.007526	0.010110	-0.006153
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	4.000000	0.500000	0.000000	0.628891	0.987560	0.372624
CON U[11]=	0.014588	0.012100	0.020939	-0.007526	0.010110	-0.006153
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	5.000000	0.500000	0.000000	0.104192	0.261785	0.577541
CON U[11]=	0.008298	0.022988	0.021030	0.014241	0.004276	0.000732
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104192	0.261785	0.577541
CON U[11]=	0.008298	0.022988	0.021030	0.014241	0.004276	0.000732
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604855	0.709016	0.480985
CON U[11]=	0.007579	0.020621	0.012796	0.008005	0.003367	0.000658
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604855	0.709016	0.480985
CON U[11]=	0.007579	0.020621	0.012796	0.008005	0.003367	0.000658
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042771	0.340530	0.276582
CON U[11]=	0.005983	0.006446	0.009869	-0.000599	0.003440	-0.000556
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042771	0.340530	0.276582
CON U[11]=	0.005983	0.006446	0.009869	-0.000599	0.003440	-0.000556
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.483955	0.000000	0.549408	0.837444	0.238616
CON U[11]=	0.006267	0.006385	0.007583	-0.000935	0.002807	-0.001024
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.483955	0.000000	0.549408	0.837444	0.238616
CON U[11]=	0.006267	0.006385	0.007583	-0.000935	0.002807	-0.001024
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032089	0.000000	0.549408	0.837444	0.238616
CON U[11]=	0.006267	0.006385	0.007583	-0.000935	0.002807	-0.001024
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.733006	0.000000	0.250410	0.654589	0.231630
CON U[11]=	0.007829	0.007050	0.007552	0.000420	0.002525	0.000137
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.238459	0.000000	0.250410	0.654589	0.231630
CON U[11]=	0.007829	0.007050	0.007552	0.000420	0.002525	0.000137
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM FEP3  9.000000  0.015004  0.000000  0.250410  0.654589  0.231630
CON U[11]= 0.007829  0.007050  0.007552  0.000420  0.002525  0.000137
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250410  0.654589  0.231630
CON U[11]= 0.007829  0.007050  0.007552  0.000420  0.002525  0.000137
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250410  0.654589  0.231630
CON U[11]= 0.007829  0.007050  0.007552  0.000420  0.002525  0.000137
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010016  0.000000  0.250410  0.654589  0.231630
CON U[11]= 0.007829  0.007050  0.007552  0.000420  0.002525  0.000137
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.003514  0.000000  0.250410  0.654589  0.231630
CON U[11]= 0.007829  0.007050  0.007552  0.000420  0.002525  0.000137
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.183334  0.000000  0.255280  0.017044  0.227912
CON U[11]= 0.009987  0.011863  0.006816  0.000528  0.000698  0.001816
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.597214  0.000000  0.255280  0.017044  0.227912
CON U[11]= 0.009987  0.011863  0.006816  0.000528  0.000698  0.001816
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.086288  0.000000  0.255280  0.017044  0.227912
CON U[11]= 0.009987  0.011863  0.006816  0.000528  0.000698  0.001816
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025523  0.000000  0.255280  0.017044  0.227912
CON U[11]= 0.009987  0.011863  0.006816  0.000528  0.000698  0.001816
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.002948  0.000000  0.255280  0.017044  0.227912
CON U[11]= 0.009987  0.011863  0.006816  0.000528  0.000698  0.001816
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.104694  1.000000  0.254272  0.050619  0.252196
CON U[11]= 0.011567  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=  1.00      0  29360128      0
END
PIG BTS-308 N.35 800°C 6 min
#
#LIST  5
READ NATOM =  30, NLAYER =  0, NELEMENT =  0, NBATCH =  0
OVERALL  0.589538  0.050000  0.050000  1.000000  0.000000  25.6412373
ATOM O    1.000000  0.500000  0.000000  0.867617  0.338425  0.169183
CON U[11]= 0.006569  0.009391  0.009453 -0.000229  0.002723  0.000264
CON SPARE=  1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  1.000000  0.500000  0.000000  0.867617  0.338425  0.169183
CON U[11]= 0.006569  0.009391  0.009453 -0.000229  0.002723  0.000264
CON SPARE=  1.00      0  25165824      0
ATOM O    2.000000  0.500000  0.000000  0.373589  0.836780  0.134829
CON U[11]= 0.006558  0.010320  0.009512 -0.000050  0.002769  0.000345
CON SPARE=  1.00      0  25165824      0
ATOM OM2  2.000000  0.500000  0.000000  0.373589  0.836780  0.134829
CON U[11]= 0.006558  0.010320  0.009512 -0.000050  0.002769  0.000345
CON SPARE=  1.00      0  25165824      0
ATOM O    3.000000  0.500000  0.000000  0.121639  0.499361  0.331979
CON U[11]= 0.012925  0.008422  0.013534 -0.001284  0.006200 -0.003299
CON SPARE=  1.00      0  25165824      0

```

ATOM OM2	3.000000	0.500000	0.000000	0.121639	0.499361	0.331979
CON U[11]=	0.012925	0.008422	0.013534	-0.001284	0.006200	-0.003299
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	4.000000	0.500000	0.000000	0.628991	0.987392	0.372964
CON U[11]=	0.014473	0.011796	0.021076	-0.007631	0.009897	-0.006279
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	4.000000	0.500000	0.000000	0.628991	0.987392	0.372964
CON U[11]=	0.014473	0.011796	0.021076	-0.007631	0.009897	-0.006279
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	5.000000	0.500000	0.000000	0.104130	0.261683	0.577197
CON U[11]=	0.008475	0.022989	0.020463	0.014033	0.004295	0.000556
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104130	0.261683	0.577197
CON U[11]=	0.008475	0.022989	0.020463	0.014033	0.004295	0.000556
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604643	0.709219	0.480969
CON U[11]=	0.007712	0.020131	0.012885	0.007748	0.003560	0.000563
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604643	0.709219	0.480969
CON U[11]=	0.007712	0.020131	0.012885	0.007748	0.003560	0.000563
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042758	0.340573	0.276767
CON U[11]=	0.005906	0.006228	0.010062	-0.000601	0.003522	-0.000616
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042758	0.340573	0.276767
CON U[11]=	0.005906	0.006228	0.010062	-0.000601	0.003522	-0.000616
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.483940	0.000000	0.549370	0.837427	0.238628
CON U[11]=	0.006201	0.006264	0.007536	-0.000938	0.002797	-0.000958
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.483940	0.000000	0.549370	0.837427	0.238628
CON U[11]=	0.006201	0.006264	0.007536	-0.000938	0.002797	-0.000958
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032119	0.000000	0.549370	0.837427	0.238628
CON U[11]=	0.006201	0.006264	0.007536	-0.000938	0.002797	-0.000958
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.729595	0.000000	0.250425	0.654603	0.231579
CON U[11]=	0.007825	0.006789	0.007520	0.000405	0.002565	0.000168
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.241783	0.000000	0.250425	0.654603	0.231579
CON U[11]=	0.007825	0.006789	0.007520	0.000405	0.002565	0.000168
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.015046	0.000000	0.250425	0.654603	0.231579
CON U[11]=	0.007825	0.006789	0.007520	0.000405	0.002565	0.000168
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250425	0.654603	0.231579
CON U[11]=	0.007825	0.006789	0.007520	0.000405	0.002565	0.000168
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250425	0.654603	0.231579
CON U[11]=	0.007825	0.006789	0.007520	0.000405	0.002565	0.000168
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.009989	0.000000	0.250425	0.654603	0.231579
CON U[11]=	0.007825	0.006789	0.007520	0.000405	0.002565	0.000168
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM MNP2  9.000000  0.003587  0.000000  0.250425  0.654603  0.231579
CON U[11]=  0.007825  0.006789  0.007520  0.000405  0.002565  0.000168
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.185356  0.000000  0.255312  0.016641  0.227667
CON U[11]=  0.009904  0.011010  0.006618  0.000329  0.000592  0.001985
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.595233  0.000000  0.255312  0.016641  0.227667
CON U[11]=  0.009904  0.011010  0.006618  0.000329  0.000592  0.001985
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.063022  0.000000  0.255312  0.016641  0.227667
CON U[11]=  0.009904  0.011010  0.006618  0.000329  0.000592  0.001985
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.025607  0.000000  0.255312  0.016641  0.227667
CON U[11]=  0.009904  0.011010  0.006618  0.000329  0.000592  0.001985
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.002905  0.000000  0.255312  0.016641  0.227667
CON U[11]=  0.009904  0.011010  0.006618  0.000329  0.000592  0.001985
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.127877  1.000000  0.253923  0.048016  0.249295
CON U[11]=  0.011915  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
END

```

PIG BTS-308 N.35 800°C 10 min

#

#LIST 5

```

READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.612639 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 30.6162453
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867691 0.338397 0.168973
CON U[11]= 0.006260 0.010069 0.009779 -0.000037 0.002806 0.000096
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0
ATOM OM2 1.000000 0.500000 0.000000 0.867691 0.338397 0.168973
CON U[11]= 0.006260 0.010069 0.009779 -0.000037 0.002806 0.000096
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0
ATOM O 2.000000 0.500000 0.000000 0.373681 0.836801 0.134681
CON U[11]= 0.006936 0.010533 0.009855 0.000131 0.003311 0.000665
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0
ATOM OM2 2.000000 0.500000 0.000000 0.373681 0.836801 0.134681
CON U[11]= 0.006936 0.010533 0.009855 0.000131 0.003311 0.000665
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0
ATOM O 3.000000 0.500000 0.000000 0.121696 0.499345 0.331982
CON U[11]= 0.012183 0.008837 0.013414 -0.001160 0.005964 -0.003333
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0
ATOM OM2 3.000000 0.500000 0.000000 0.121696 0.499345 0.331982
CON U[11]= 0.012183 0.008837 0.013414 -0.001160 0.005964 -0.003333
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0
ATOM O 4.000000 0.500000 0.000000 0.629029 0.987404 0.373158
CON U[11]= 0.014233 0.012389 0.021237 -0.007529 0.010025 -0.006056
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0
ATOM OM2 4.000000 0.500000 0.000000 0.629029 0.987404 0.373158
CON U[11]= 0.014233 0.012389 0.021237 -0.007529 0.010025 -0.006056
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0
ATOM O 5.000000 0.500000 0.000000 0.104148 0.261970 0.577441
CON U[11]= 0.008445 0.021896 0.020595 0.013716 0.004436 0.000713
CON SPARE= 1.00      0  25165824      0

```

ATOM OM2	5.000000	0.500000	0.000000	0.104148	0.261970	0.577441
CON U[11]=	0.008445	0.021896	0.020595	0.013716	0.004436	0.000713
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM O	6.000000	0.500000	0.000000	0.604749	0.709205	0.481128
CON U[11]=	0.007195	0.020652	0.013052	0.007756	0.003281	0.000171
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM OM2	6.000000	0.500000	0.000000	0.604749	0.709205	0.481128
CON U[11]=	0.007195	0.020652	0.013052	0.007756	0.003281	0.000171
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	7.000000	0.500000	0.000000	0.042728	0.340529	0.276842
CON U[11]=	0.005722	0.006601	0.010163	-0.000669	0.003451	-0.000514
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042728	0.340529	0.276842
CON U[11]=	0.005722	0.006601	0.010163	-0.000669	0.003451	-0.000514
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.483993	0.000000	0.549408	0.837441	0.238590
CON U[11]=	0.006185	0.006540	0.007807	-0.000937	0.002770	-0.001055
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.483993	0.000000	0.549408	0.837441	0.238590
CON U[11]=	0.006185	0.006540	0.007807	-0.000937	0.002770	-0.001055
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032014	0.000000	0.549408	0.837441	0.238590
CON U[11]=	0.006185	0.006540	0.007807	-0.000937	0.002770	-0.001055
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.723583	0.000000	0.250421	0.654547	0.231553
CON U[11]=	0.007633	0.007059	0.007765	0.000409	0.002499	0.000153
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.247813	0.000000	0.250421	0.654547	0.231553
CON U[11]=	0.007633	0.007059	0.007765	0.000409	0.002499	0.000153
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014871	0.000000	0.250421	0.654547	0.231553
CON U[11]=	0.007633	0.007059	0.007765	0.000409	0.002499	0.000153
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250421	0.654547	0.231553
CON U[11]=	0.007633	0.007059	0.007765	0.000409	0.002499	0.000153
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250421	0.654547	0.231553
CON U[11]=	0.007633	0.007059	0.007765	0.000409	0.002499	0.000153
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010058	0.000000	0.250421	0.654547	0.231553
CON U[11]=	0.007633	0.007059	0.007765	0.000409	0.002499	0.000153
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003674	0.000000	0.250421	0.654547	0.231553
CON U[11]=	0.007633	0.007059	0.007765	0.000409	0.002499	0.000153
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.194047	0.000000	0.255273	0.016803	0.227659
CON U[11]=	0.009749	0.011409	0.006594	0.000368	0.000639	0.001878
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	10.000000	0.586794	0.000000	0.255273	0.016803	0.227659
CON U[11]=	0.009749	0.011409	0.006594	0.000368	0.000639	0.001878
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	10.000000	0.069118	0.000000	0.255273	0.016803	0.227659
CON U[11]=	0.009749	0.011409	0.006594	0.000368	0.000639	0.001878
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

```

ATOM MNP2  10.000000  0.025227  0.000000  0.255273  0.016803  0.227659
CON U[11]=  0.009749  0.011409  0.006594  0.000368  0.000639  0.001878
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1  10.000000  0.002974  0.000000  0.255273  0.016803  0.227659
CON U[11]=  0.009749  0.011409  0.006594  0.000368  0.000639  0.001878
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2  11.000000  0.121839  1.000000  0.254427  0.049023  0.251648
CON U[11]=  0.013163  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
END
PIG BTS-308 N.35 800°C 18 min
#
#LIST    5
READ NATOM =   30, NLAYER =   0, NELEMENT =   0, NBATCH =   0
OVERALL  0.591994  0.050000  0.050000  1.000000  0.000000    26.9583778
ATOM O    1.000000  0.500000  0.000000  0.867736  0.338408  0.169294
CON U[11]=  0.006634  0.009789  0.009514 -0.000193  0.002695  0.000122
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   1.000000  0.500000  0.000000  0.867736  0.338408  0.169294
CON U[11]=  0.006634  0.009789  0.009514 -0.000193  0.002695  0.000122
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     2.000000  0.500000  0.000000  0.373798  0.836847  0.135065
CON U[11]=  0.007306  0.010080  0.009768  0.000065  0.003204  0.000424
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   2.000000  0.500000  0.000000  0.373798  0.836847  0.135065
CON U[11]=  0.007306  0.010080  0.009768  0.000065  0.003204  0.000424
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     3.000000  0.500000  0.000000  0.121657  0.499294  0.331931
CON U[11]=  0.012565  0.008626  0.013337 -0.001453  0.005779 -0.003507
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   3.000000  0.500000  0.000000  0.121657  0.499294  0.331931
CON U[11]=  0.012565  0.008626  0.013337 -0.001453  0.005779 -0.003507
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     4.000000  0.500000  0.000000  0.628907  0.987307  0.373193
CON U[11]=  0.015064  0.012254  0.021388 -0.007748  0.010378 -0.006425
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   4.000000  0.500000  0.000000  0.628907  0.987307  0.373193
CON U[11]=  0.015064  0.012254  0.021388 -0.007748  0.010378 -0.006425
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     5.000000  0.500000  0.000000  0.104055  0.262089  0.577934
CON U[11]=  0.008809  0.022918  0.021238  0.013806  0.004840  0.000864
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   5.000000  0.500000  0.000000  0.104055  0.262089  0.577934
CON U[11]=  0.008809  0.022918  0.021238  0.013806  0.004840  0.000864
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM O     6.000000  0.500000  0.000000  0.604801  0.708909  0.480541
CON U[11]=  0.008113  0.021057  0.012654  0.007938  0.003626  0.000679
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM OM2   6.000000  0.500000  0.000000  0.604801  0.708909  0.480541
CON U[11]=  0.008113  0.021057  0.012654  0.007938  0.003626  0.000679
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0
ATOM SI    7.000000  0.500000  0.000000  0.042812  0.340504  0.276914
CON U[11]=  0.006148  0.006390  0.010133 -0.000705  0.003617 -0.000593
CON SPARE=   1.00      0  25165824      0

```


ATOM SIP4	7.000000	0.500000	0.000000	0.042812	0.340504	0.276914
CON U[11]=	0.006148	0.006390	0.010133	-0.000705	0.003617	-0.000593
CON SPARE=	1.00	0	25165824	0		
ATOM SI	8.000000	0.483974	0.000000	0.549439	0.837435	0.238634
CON U[11]=	0.006511	0.006434	0.007668	-0.000937	0.002949	-0.001058
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM SIP4	8.000000	0.483974	0.000000	0.549439	0.837435	0.238634
CON U[11]=	0.006511	0.006434	0.007668	-0.000937	0.002949	-0.001058
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	8.000000	0.032053	0.000000	0.549439	0.837435	0.238634
CON U[11]=	0.006511	0.006434	0.007668	-0.000937	0.002949	-0.001058
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	9.000000	0.719448	0.000000	0.250432	0.654512	0.231510
CON U[11]=	0.008103	0.007041	0.007952	0.000337	0.002797	0.000132
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	9.000000	0.251832	0.000000	0.250432	0.654512	0.231510
CON U[11]=	0.008103	0.007041	0.007952	0.000337	0.002797	0.000132
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP3	9.000000	0.014938	0.000000	0.250432	0.654512	0.231510
CON U[11]=	0.008103	0.007041	0.007952	0.000337	0.002797	0.000132
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM ALP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250432	0.654512	0.231510
CON U[11]=	0.008103	0.007041	0.007952	0.000337	0.002797	0.000132
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CRP3	9.000000	0.000000	0.000000	0.250432	0.654512	0.231510
CON U[11]=	0.008103	0.007041	0.007952	0.000337	0.002797	0.000132
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM TIP4	9.000000	0.010023	0.000000	0.250432	0.654512	0.231510
CON U[11]=	0.008103	0.007041	0.007952	0.000337	0.002797	0.000132
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	9.000000	0.003759	0.000000	0.250432	0.654512	0.231510
CON U[11]=	0.008103	0.007041	0.007952	0.000337	0.002797	0.000132
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MGP2	10.000000	0.196750	0.000000	0.255318	0.016718	0.227655
CON U[11]=	0.010215	0.011390	0.007019	0.000503	0.000847	0.001955
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM FEP2	10.000000	0.584274	0.000000	0.255318	0.016718	0.227655
CON U[11]=	0.010215	0.011390	0.007019	0.000503	0.000847	0.001955
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	10.000000	0.068696	0.000000	0.255318	0.016718	0.227655
CON U[11]=	0.010215	0.011390	0.007019	0.000503	0.000847	0.001955
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM MNP2	10.000000	0.025288	0.000000	0.255318	0.016718	0.227655
CON U[11]=	0.010215	0.011390	0.007019	0.000503	0.000847	0.001955
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM NAP1	10.000000	0.002932	0.000000	0.255318	0.016718	0.227655
CON U[11]=	0.010215	0.011390	0.007019	0.000503	0.000847	0.001955
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		
ATOM CAP2	11.000000	0.122058	1.000000	0.254205	0.048504	0.249535
CON U[11]=	0.012509	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
CON SPARE=	1.00	0	29360128	0		

END

PIG BTS-308 N.13 800°C 60 min

#

#LIST 5

```
READ NATOM = 30, NLAYER = 0, NELEMENT = 0, NBATCH = 0
OVERALL 0.620135 0.050000 0.050000 1.000000 0.000000 43.4061165
ATOM O 1.000000 0.500000 0.000000 0.867503 0.338360 0.169860
CON U[11]= 0.006708 0.009564 0.009657 -0.000012 0.002669 0.000132
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 1.000000 0.500000 0.000000 0.867503 0.338360 0.169860
CON U[11]= 0.006708 0.009564 0.009657 -0.000012 0.002669 0.000132
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 2.000000 0.500000 0.000000 0.373643 0.836806 0.134674
CON U[11]= 0.006869 0.010265 0.010029 -0.000087 0.003221 0.000351
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 2.000000 0.500000 0.000000 0.373643 0.836806 0.134674
CON U[11]= 0.006869 0.010265 0.010029 -0.000087 0.003221 0.000351
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 3.000000 0.500000 0.000000 0.121842 0.499339 0.331473
CON U[11]= 0.012862 0.008471 0.012819 -0.001528 0.006258 -0.003394
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 3.000000 0.500000 0.000000 0.121842 0.499339 0.331473
CON U[11]= 0.012862 0.008471 0.012819 -0.001528 0.006258 -0.003394
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 4.000000 0.500000 0.000000 0.629215 0.987161 0.373353
CON U[11]= 0.014737 0.011807 0.021016 -0.007607 0.010286 -0.006304
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 4.000000 0.500000 0.000000 0.629215 0.987161 0.373353
CON U[11]= 0.014737 0.011807 0.021016 -0.007607 0.010286 -0.006304
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 5.000000 0.500000 0.000000 0.103949 0.262512 0.579004
CON U[11]= 0.008784 0.022109 0.019553 0.012611 0.003945 0.000791
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 5.000000 0.500000 0.000000 0.103949 0.262512 0.579004
CON U[11]= 0.008784 0.022109 0.019553 0.012611 0.003945 0.000791
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM O 6.000000 0.500000 0.000000 0.604789 0.708736 0.480196
CON U[11]= 0.008019 0.019792 0.013110 0.007491 0.002839 0.000232
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM OM2 6.000000 0.500000 0.000000 0.604789 0.708736 0.480196
CON U[11]= 0.008019 0.019792 0.013110 0.007491 0.002839 0.000232
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 7.000000 0.500000 0.000000 0.042818 0.340477 0.277474
CON U[11]= 0.006000 0.006455 0.009961 -0.000670 0.003340 -0.000582
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SIP4 7.000000 0.500000 0.000000 0.042818 0.340477 0.277474
CON U[11]= 0.006000 0.006455 0.009961 -0.000670 0.003340 -0.000582
CON SPARE= 1.00 0 25165824 0
ATOM SI 8.000000 0.484041 0.000000 0.549609 0.837378 0.238426
CON U[11]= 0.006197 0.006376 0.007886 -0.000978 0.002750 -0.001021
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
ATOM SIP4 8.000000 0.484041 0.000000 0.549609 0.837378 0.238426
CON U[11]= 0.006197 0.006376 0.007886 -0.000978 0.002750 -0.001021
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
ATOM ALP3 8.000000 0.031918 0.000000 0.549609 0.837378 0.238426
CON U[11]= 0.006197 0.006376 0.007886 -0.000978 0.002750 -0.001021
CON SPARE= 1.00 0 29360128 0
```

```

ATOM MGP2  9.000000  0.720572  0.000000  0.250461  0.654532  0.231116
CON U[11]=  0.007711  0.007171  0.007672  0.000416  0.002449  0.000138
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP2  9.000000  0.250856  0.000000  0.250461  0.654532  0.231116
CON U[11]=  0.007711  0.007171  0.007672  0.000416  0.002449  0.000138
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP3  9.000000  0.014771  0.000000  0.250461  0.654532  0.231116
CON U[11]=  0.007711  0.007171  0.007672  0.000416  0.002449  0.000138
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM ALP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250461  0.654532  0.231116
CON U[11]=  0.007711  0.007171  0.007672  0.000416  0.002449  0.000138
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CRP3  9.000000  0.000000  0.000000  0.250461  0.654532  0.231116
CON U[11]=  0.007711  0.007171  0.007672  0.000416  0.002449  0.000138
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM TIP4  9.000000  0.010094  0.000000  0.250461  0.654532  0.231116
CON U[11]=  0.007711  0.007171  0.007672  0.000416  0.002449  0.000138
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2  9.000000  0.003706  0.000000  0.250461  0.654532  0.231116
CON U[11]=  0.007711  0.007171  0.007672  0.000416  0.002449  0.000138
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MGP2 10.000000  0.199358  0.000000  0.255404  0.016822  0.227525
CON U[11]=  0.010191  0.011673  0.007229  0.000561  0.000695  0.001940
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM FEP2 10.000000  0.581686  0.000000  0.255404  0.016822  0.227525
CON U[11]=  0.010191  0.011673  0.007229  0.000561  0.000695  0.001940
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 10.000000  0.087046  0.000000  0.255404  0.016822  0.227525
CON U[11]=  0.010191  0.011673  0.007229  0.000561  0.000695  0.001940
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM MNP2 10.000000  0.024924  0.000000  0.255404  0.016822  0.227525
CON U[11]=  0.010191  0.011673  0.007229  0.000561  0.000695  0.001940
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM NAP1 10.000000  0.003041  0.000000  0.255404  0.016822  0.227525
CON U[11]=  0.010191  0.011673  0.007229  0.000561  0.000695  0.001940
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
ATOM CAP2 11.000000  0.103944  1.000000  0.254217  0.049436  0.249829
CON U[11]=  0.010248  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
CON SPARE=   1.00      0  29360128      0
END

```