

apt5301:FORTTRAN harshadbhadeshia\$ ./crystal

```
*****
**                                                                 **
**              CAMBRIDGE UNIVERSITY                               **
**                                                                 **
**              PRACTICAL CRYSTALLOGRAPHY                         **
**              Version 1.7                                       **
**                                                                 **
**      1. Analysis of Electron Diffraction                       **
**      2. Calculation of Metric Tensor                          **
**      3. Interplanar Spacings                                 **
**      4. Angles between Vectors                               **
**      5. Convert between Real & Reciprocal                    **
**      6. Axis-Angle Pairs                                     **
**      7. Orientation Relations                                **
**      8. Documentation          10. Vector Size               **
**      9. Four Index Notation    11. Exit                      **
**                                                                 **
**              by H. K. D. H. Bhadeshia                         **
**                                                                 **
**              Choose program number .....                    **
**                                                                 **
*****
```

```

*****
**                                                                 **
**                                                                 **
**              PRACTICAL CRYSTALLOGRAPHY                          **
**              Version 1.0                                         **
**                                                                 **
**              Coordinate Transformations                          **
**              (Orientation Relationships)                          **
**                                                                 **
**              Copyright:                1993                      **
**                                                                 **
*****

```

Press Return.....

Input data consist of four vectors (real or reciprocal):

(Vector 1 of Crystal 1) parallel to (Vector 1 of Crystal 2)

(Vector 2 of Crystal 1) parallel to (Vector 2 of Crystal 2)

....Press Return....

Choose Crystal System for \*\* CRYSTAL 1 \*\*

1 = Cubic	4 = Hexagonal or Trigonal
2 = Tetragonal	5 = Monoclinic
3 = Orthorhombic	6 = Triclinic

3

Lattice Parameters "a", "b", "c" ?

4.5165  
5.0837  
6.7297

ORTHORHOMBIC SYSTEM    4.5165    5.0837    6.7297 ANGSTROMS

Choose Crystal System for \*\* CRYSTAL 2 \*\*

- |                  |                           |
|------------------|---------------------------|
| 1 = Cubic        | 4 = Hexagonal or Trigonal |
| 2 = Tetragonal   | 5 = Monoclinic            |
| 3 = Orthorhombic | 6 = Triclinic             |

1

Lattice Parameter ?

2.867

CUBIC SYSTEM 2.8670 ANGSTROMS

0 0 1	Components of VECTOR 1 of CRYSTAL 1 ?
1	Components REAL( =0) or RECIPROCAL( =1) ?
1 0 0	Components of VECTOR 2 of CRYSTAL 1 ?
0	Components REAL( =0) or RECIPROCAL( =1) ?
2 1 1	Components of VECTOR 1 of CRYSTAL 2 ?
1	Components REAL( =0) or RECIPROCAL( =1) ?
0 -1 1	Components of VECTOR 2 of CRYSTAL 2 ?
0	Components REAL( =0) or RECIPROCAL( =1) ?

\*\*\*\*\*

CRYSTAL 1 [ 0.000 0.000 1.000] parallel to [ 2.000 1.000 1.000] CRYSTAL 2

CRYSTAL 1 [ 1.000 0.000 0.000] parallel to [ 0.000 -1.000 1.000] CRYSTAL 2

\*\* COORDINATE TRANSFORMATION MATRIX (1 J 2) \*\*

0.000000	-0.448860	0.448860
0.325602	-0.325602	-0.325602
0.347845	0.173923	0.173923

\*\* INVERSE TRANSFORMATION MATRIX (2 J 1) \*\*

0.000000	1.023745	1.916560
-1.113934	-1.023745	0.958280
1.113934	-1.023745	0.958280

\*\*\*\*\*

List parallel vectors? (0 = No, 1 = Yes)

1

Specify maximum value of Miller Index (e.g., 3)

3

(PLANE: CRYSTAL 1)			(PLANE: CRYSTAL 2)		
-3.0000	-3.0000	-3.0000	-2.0203	1.8016	-0.8915
-3.0000	-3.0000	-2.0000	-1.6725	1.9755	-0.7176
-3.0000	-3.0000	-1.0000	-1.3247	2.1495	-0.5437
-3.0000	-3.0000	0.0000	-0.9768	2.3234	-0.3698
-3.0000	-3.0000	1.0000	-0.6290	2.4973	-0.1959
-3.0000	-3.0000	2.0000	-0.2811	2.6712	-0.0219
-3.0000	-3.0000	3.0000	0.0667	2.8452	0.1520
-3.0000	-2.0000	-3.0000	-1.6947	1.4760	-1.2171
-3.0000	-2.0000	-2.0000	-1.3469	1.6499	-1.0432
-3.0000	-2.0000	-1.0000	-0.9990	1.8239	-0.8693
-3.0000	-2.0000	0.0000	-0.6512	1.9978	-0.6954
-3.0000	-2.0000	1.0000	-0.3034	2.1717	-0.5215
-3.0000	-2.0000	2.0000	0.0445	2.3456	-0.3475
-3.0000	-2.0000	3.0000	0.3923	2.5196	-0.1736
-3.0000	-1.0000	-3.0000	-1.3691	1.1504	-1.5427
-3.0000	-1.0000	-2.0000	-1.0213	1.3243	-1.3688
-3.0000	-1.0000	-1.0000	-0.6734	1.4983	-1.1949
-3.0000	-1.0000	0.0000	-0.3256	1.6722	-1.0210
-3.0000	-1.0000	1.0000	0.0222	1.8461	-0.8471
-3.0000	-1.0000	2.0000	0.3701	2.0200	-0.6731
-3.0000	-1.0000	3.0000	0.7179	2.1939	-0.4992
-3.0000	0.0000	-3.0000	-1.0435	0.8248	-1.8683
-3.0000	0.0000	-2.0000	-0.6957	0.9987	-1.6944
-3.0000	0.0000	-1.0000	-0.3478	1.1727	-1.5205
-3.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.3466	-1.3466
-3.0000	0.0000	1.0000	0.3478	1.5205	-1.1727
-3.0000	0.0000	2.0000	0.6957	1.6944	-0.9987
-3.0000	0.0000	3.0000	1.0435	1.8683	-0.8248
-3.0000	1.0000	-3.0000	-0.7179	0.4992	-2.1939
-3.0000	1.0000	-2.0000	-0.3701	0.6731	-2.0200
-3.0000	1.0000	-1.0000	-0.0222	0.8471	-1.8461
-3.0000	1.0000	0.0000	0.3256	1.0210	-1.6722
-3.0000	1.0000	1.0000	0.6734	1.1949	-1.4983
-3.0000	1.0000	2.0000	1.0213	1.3688	-1.3243
-3.0000	1.0000	3.0000	1.3691	1.5427	-1.1504
-3.0000	2.0000	-3.0000	-0.3923	0.1736	-2.5196
-3.0000	2.0000	-2.0000	-0.0445	0.3475	-2.3456
-3.0000	2.0000	-1.0000	0.3034	0.5215	-2.1717
-3.0000	2.0000	0.0000	0.6512	0.6954	-1.9978
-3.0000	2.0000	1.0000	0.9990	0.8693	-1.8239
-3.0000	2.0000	2.0000	1.3469	1.0432	-1.6499
-3.0000	2.0000	3.0000	1.6947	1.2171	-1.4760
-3.0000	3.0000	-3.0000	-0.0667	-0.1520	-2.8452
-3.0000	3.0000	-2.0000	0.2811	0.0219	-2.6712
-3.0000	3.0000	-1.0000	0.6290	0.1959	-2.4973
-3.0000	3.0000	0.0000	0.9768	0.3698	-2.3234
-3.0000	3.0000	1.0000	1.3247	0.5437	-2.1495
-3.0000	3.0000	2.0000	1.6725	0.7176	-1.9755
-3.0000	3.0000	3.0000	2.0203	0.8915	-1.8016
-2.0000	-3.0000	-3.0000	-2.0203	1.3528	-0.4427

-2.0000	-3.0000	-2.0000	-1.6725	1.5267	-0.2688
-2.0000	-3.0000	-1.0000	-1.3247	1.7006	-0.0948
-2.0000	-3.0000	0.0000	-0.9768	1.8745	0.0791
-2.0000	-3.0000	1.0000	-0.6290	2.0484	0.2530
-2.0000	-3.0000	2.0000	-0.2811	2.2224	0.4269
-2.0000	-3.0000	3.0000	0.0667	2.3963	0.6009
-2.0000	-2.0000	-3.0000	-1.6947	1.0272	-0.7683
-2.0000	-2.0000	-2.0000	-1.3469	1.2011	-0.5944
-2.0000	-2.0000	-1.0000	-0.9990	1.3750	-0.4204
-2.0000	-2.0000	0.0000	-0.6512	1.5489	-0.2465
-2.0000	-2.0000	1.0000	-0.3034	1.7228	-0.0726
-2.0000	-2.0000	2.0000	0.0445	1.8968	0.1013
-2.0000	-2.0000	3.0000	0.3923	2.0707	0.2753
-2.0000	-1.0000	-3.0000	-1.3691	0.7016	-1.0939
-2.0000	-1.0000	-2.0000	-1.0213	0.8755	-0.9200
-2.0000	-1.0000	-1.0000	-0.6734	1.0494	-0.7460
-2.0000	-1.0000	0.0000	-0.3256	1.2233	-0.5721
-2.0000	-1.0000	1.0000	0.0222	1.3972	-0.3982
-2.0000	-1.0000	2.0000	0.3701	1.5712	-0.2243
-2.0000	-1.0000	3.0000	0.7179	1.7451	-0.0503
-2.0000	0.0000	-3.0000	-1.0435	0.3760	-1.4195
-2.0000	0.0000	-2.0000	-0.6957	0.5499	-1.2456
-2.0000	0.0000	-1.0000	-0.3478	0.7238	-1.0716
-2.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.8977	-0.8977
-2.0000	0.0000	1.0000	0.3478	1.0716	-0.7238
-2.0000	0.0000	2.0000	0.6957	1.2456	-0.5499
-2.0000	0.0000	3.0000	1.0435	1.4195	-0.3760
-2.0000	1.0000	-3.0000	-0.7179	0.0503	-1.7451
-2.0000	1.0000	-2.0000	-0.3701	0.2243	-1.5712
-2.0000	1.0000	-1.0000	-0.0222	0.3982	-1.3972
-2.0000	1.0000	0.0000	0.3256	0.5721	-1.2233
-2.0000	1.0000	1.0000	0.6734	0.7460	-1.0494
-2.0000	1.0000	2.0000	1.0213	0.9200	-0.8755
-2.0000	1.0000	3.0000	1.3691	1.0939	-0.7016
-2.0000	2.0000	-3.0000	-0.3923	-0.2753	-2.0707
-2.0000	2.0000	-2.0000	-0.0445	-0.1013	-1.8968
-2.0000	2.0000	-1.0000	0.3034	0.0726	-1.7228
-2.0000	2.0000	0.0000	0.6512	0.2465	-1.5489
-2.0000	2.0000	1.0000	0.9990	0.4204	-1.3750
-2.0000	2.0000	2.0000	1.3469	0.5944	-1.2011
-2.0000	2.0000	3.0000	1.6947	0.7683	-1.0272
-2.0000	3.0000	-3.0000	-0.0667	-0.6009	-2.3963
-2.0000	3.0000	-2.0000	0.2811	-0.4269	-2.2224
-2.0000	3.0000	-1.0000	0.6290	-0.2530	-2.0484
-2.0000	3.0000	0.0000	0.9768	-0.0791	-1.8745
-2.0000	3.0000	1.0000	1.3247	0.0948	-1.7006
-2.0000	3.0000	2.0000	1.6725	0.2688	-1.5267
-2.0000	3.0000	3.0000	2.0203	0.4427	-1.3528
-1.0000	-3.0000	-3.0000	-2.0203	0.9039	0.0062
-1.0000	-3.0000	-2.0000	-1.6725	1.0778	0.1801
-1.0000	-3.0000	-1.0000	-1.3247	1.2517	0.3540
-1.0000	-3.0000	0.0000	-0.9768	1.4257	0.5279
-1.0000	-3.0000	1.0000	-0.6290	1.5996	0.7019
-1.0000	-3.0000	2.0000	-0.2811	1.7735	0.8758
-1.0000	-3.0000	3.0000	0.0667	1.9474	1.0497
-1.0000	-2.0000	-3.0000	-1.6947	0.5783	-0.3194
-1.0000	-2.0000	-2.0000	-1.3469	0.7522	-0.1455
-1.0000	-2.0000	-1.0000	-0.9990	0.9261	0.0284
-1.0000	-2.0000	0.0000	-0.6512	1.1001	0.2023
-1.0000	-2.0000	1.0000	-0.3034	1.2740	0.3763
-1.0000	-2.0000	2.0000	0.0445	1.4479	0.5502
-1.0000	-2.0000	3.0000	0.3923	1.6218	0.7241
-1.0000	-1.0000	-3.0000	-1.3691	0.2527	-0.6450
-1.0000	-1.0000	-2.0000	-1.0213	0.4266	-0.4711
-1.0000	-1.0000	-1.0000	-0.6734	0.6005	-0.2972

-1.0000	-1.0000	0.0000	-0.3256	0.7745	-0.1233
-1.0000	-1.0000	1.0000	0.0222	0.9484	0.0507
-1.0000	-1.0000	2.0000	0.3701	1.1223	0.2246
-1.0000	-1.0000	3.0000	0.7179	1.2962	0.3985
-1.0000	0.0000	-3.0000	-1.0435	-0.0729	-0.9706
-1.0000	0.0000	-2.0000	-0.6957	0.1010	-0.7967
-1.0000	0.0000	-1.0000	-0.3478	0.2749	-0.6228
-1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4489	-0.4489
-1.0000	0.0000	1.0000	0.3478	0.6228	-0.2749
-1.0000	0.0000	2.0000	0.6957	0.7967	-0.1010
-1.0000	0.0000	3.0000	1.0435	0.9706	0.0729
-1.0000	1.0000	-3.0000	-0.7179	-0.3985	-1.2962
-1.0000	1.0000	-2.0000	-0.3701	-0.2246	-1.1223
-1.0000	1.0000	-1.0000	-0.0222	-0.0507	-0.9484
-1.0000	1.0000	0.0000	0.3256	0.1233	-0.7745
-1.0000	1.0000	1.0000	0.6734	0.2972	-0.6005
-1.0000	1.0000	2.0000	1.0213	0.4711	-0.4266
-1.0000	1.0000	3.0000	1.3691	0.6450	-0.2527
-1.0000	2.0000	-3.0000	-0.3923	-0.7241	-1.6218
-1.0000	2.0000	-2.0000	-0.0445	-0.5502	-1.4479
-1.0000	2.0000	-1.0000	0.3034	-0.3763	-1.2740
-1.0000	2.0000	0.0000	0.6512	-0.2023	-1.1001
-1.0000	2.0000	1.0000	0.9990	-0.0284	-0.9261
-1.0000	2.0000	2.0000	1.3469	0.1455	-0.7522
-1.0000	2.0000	3.0000	1.6947	0.3194	-0.5783
-1.0000	3.0000	-3.0000	-0.0667	-1.0497	-1.9474
-1.0000	3.0000	-2.0000	0.2811	-0.8758	-1.7735
-1.0000	3.0000	-1.0000	0.6290	-0.7019	-1.5996
-1.0000	3.0000	0.0000	0.9768	-0.5279	-1.4257
-1.0000	3.0000	1.0000	1.3247	-0.3540	-1.2517
-1.0000	3.0000	2.0000	1.6725	-0.1801	-1.0778
-1.0000	3.0000	3.0000	2.0203	-0.0062	-0.9039
0.0000	-3.0000	-3.0000	-2.0203	0.4550	0.4550
0.0000	-3.0000	-2.0000	-1.6725	0.6290	0.6290
0.0000	-3.0000	-1.0000	-1.3247	0.8029	0.8029
0.0000	-3.0000	0.0000	-0.9768	0.9768	0.9768
0.0000	-3.0000	1.0000	-0.6290	1.1507	1.1507
0.0000	-3.0000	2.0000	-0.2811	1.3247	1.3247
0.0000	-3.0000	3.0000	0.0667	1.4986	1.4986
0.0000	-2.0000	-3.0000	-1.6947	0.1294	0.1294
0.0000	-2.0000	-2.0000	-1.3469	0.3034	0.3034
0.0000	-2.0000	-1.0000	-0.9990	0.4773	0.4773
0.0000	-2.0000	0.0000	-0.6512	0.6512	0.6512
0.0000	-2.0000	1.0000	-0.3034	0.8251	0.8251
0.0000	-2.0000	2.0000	0.0445	0.9990	0.9990
0.0000	-2.0000	3.0000	0.3923	1.1730	1.1730
0.0000	-1.0000	-3.0000	-1.3691	-0.1962	-0.1962
0.0000	-1.0000	-2.0000	-1.0213	-0.0222	-0.0222
0.0000	-1.0000	-1.0000	-0.6734	0.1517	0.1517
0.0000	-1.0000	0.0000	-0.3256	0.3256	0.3256
0.0000	-1.0000	1.0000	0.0222	0.4995	0.4995
0.0000	-1.0000	2.0000	0.3701	0.6734	0.6734
0.0000	-1.0000	3.0000	0.7179	0.8474	0.8474
0.0000	0.0000	-3.0000	-1.0435	-0.5218	-0.5218
0.0000	0.0000	-2.0000	-0.6957	-0.3478	-0.3478
0.0000	0.0000	-1.0000	-0.3478	-0.1739	-0.1739
0.0000	0.0000	1.0000	0.3478	0.1739	0.1739
0.0000	0.0000	2.0000	0.6957	0.3478	0.3478
0.0000	0.0000	3.0000	1.0435	0.5218	0.5218
0.0000	1.0000	-3.0000	-0.7179	-0.8474	-0.8474
0.0000	1.0000	-2.0000	-0.3701	-0.6734	-0.6734
0.0000	1.0000	-1.0000	-0.0222	-0.4995	-0.4995
0.0000	1.0000	0.0000	0.3256	-0.3256	-0.3256
0.0000	1.0000	1.0000	0.6734	-0.1517	-0.1517
0.0000	1.0000	2.0000	1.0213	0.0222	0.0222

0.0000	1.0000	3.0000	1.3691	0.1962	0.1962
0.0000	2.0000	-3.0000	-0.3923	-1.1730	-1.1730
0.0000	2.0000	-2.0000	-0.0445	-0.9990	-0.9990
0.0000	2.0000	-1.0000	0.3034	-0.8251	-0.8251
0.0000	2.0000	0.0000	0.6512	-0.6512	-0.6512
0.0000	2.0000	1.0000	0.9990	-0.4773	-0.4773
0.0000	2.0000	2.0000	1.3469	-0.3034	-0.3034
0.0000	2.0000	3.0000	1.6947	-0.1294	-0.1294
0.0000	3.0000	-3.0000	-0.0667	-1.4986	-1.4986
0.0000	3.0000	-2.0000	0.2811	-1.3247	-1.3247
0.0000	3.0000	-1.0000	0.6290	-1.1507	-1.1507
0.0000	3.0000	0.0000	0.9768	-0.9768	-0.9768
0.0000	3.0000	1.0000	1.3247	-0.8029	-0.8029
0.0000	3.0000	2.0000	1.6725	-0.6290	-0.6290
0.0000	3.0000	3.0000	2.0203	-0.4550	-0.4550
1.0000	-3.0000	-3.0000	-2.0203	0.0062	0.9039
1.0000	-3.0000	-2.0000	-1.6725	0.1801	1.0778
1.0000	-3.0000	-1.0000	-1.3247	0.3540	1.2517
1.0000	-3.0000	0.0000	-0.9768	0.5279	1.4257
1.0000	-3.0000	1.0000	-0.6290	0.7019	1.5996
1.0000	-3.0000	2.0000	-0.2811	0.8758	1.7735
1.0000	-3.0000	3.0000	0.0667	1.0497	1.9474
1.0000	-2.0000	-3.0000	-1.6947	-0.3194	0.5783
1.0000	-2.0000	-2.0000	-1.3469	-0.1455	0.7522
1.0000	-2.0000	-1.0000	-0.9990	0.0284	0.9261
1.0000	-2.0000	0.0000	-0.6512	0.2023	1.1001
1.0000	-2.0000	1.0000	-0.3034	0.3763	1.2740
1.0000	-2.0000	2.0000	0.0445	0.5502	1.4479
1.0000	-2.0000	3.0000	0.3923	0.7241	1.6218
1.0000	-1.0000	-3.0000	-1.3691	-0.6450	0.2527
1.0000	-1.0000	-2.0000	-1.0213	-0.4711	0.4266
1.0000	-1.0000	-1.0000	-0.6734	-0.2972	0.6005
1.0000	-1.0000	0.0000	-0.3256	-0.1233	0.7745
1.0000	-1.0000	1.0000	0.0222	0.0507	0.9484
1.0000	-1.0000	2.0000	0.3701	0.2246	1.1223
1.0000	-1.0000	3.0000	0.7179	0.3985	1.2962
1.0000	0.0000	-3.0000	-1.0435	-0.9706	-0.0729
1.0000	0.0000	-2.0000	-0.6957	-0.7967	0.1010
1.0000	0.0000	-1.0000	-0.3478	-0.6228	0.2749
1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.4489	0.4489
1.0000	0.0000	1.0000	0.3478	-0.2749	0.6228
1.0000	0.0000	2.0000	0.6957	-0.1010	0.7967
1.0000	0.0000	3.0000	1.0435	0.0729	0.9706
1.0000	1.0000	-3.0000	-0.7179	-1.2962	-0.3985
1.0000	1.0000	-2.0000	-0.3701	-1.1223	-0.2246
1.0000	1.0000	-1.0000	-0.0222	-0.9484	-0.0507
1.0000	1.0000	0.0000	0.3256	-0.7745	0.1233
1.0000	1.0000	1.0000	0.6734	-0.6005	0.2972
1.0000	1.0000	2.0000	1.0213	-0.4266	0.4711
1.0000	1.0000	3.0000	1.3691	-0.2527	0.6450
1.0000	2.0000	-3.0000	-0.3923	-1.6218	-0.7241
1.0000	2.0000	-2.0000	-0.0445	-1.4479	-0.5502
1.0000	2.0000	-1.0000	0.3034	-1.2740	-0.3763
1.0000	2.0000	0.0000	0.6512	-1.1001	-0.2023
1.0000	2.0000	1.0000	0.9990	-0.9261	-0.0284
1.0000	2.0000	2.0000	1.3469	-0.7522	0.1455
1.0000	2.0000	3.0000	1.6947	-0.5783	0.3194
1.0000	3.0000	-3.0000	-0.0667	-1.9474	-1.0497
1.0000	3.0000	-2.0000	0.2811	-1.7735	-0.8758
1.0000	3.0000	-1.0000	0.6290	-1.5996	-0.7019
1.0000	3.0000	0.0000	0.9768	-1.4257	-0.5279
1.0000	3.0000	1.0000	1.3247	-1.2517	-0.3540
1.0000	3.0000	2.0000	1.6725	-1.0778	-0.1801
1.0000	3.0000	3.0000	2.0203	-0.9039	-0.0062
2.0000	-3.0000	-3.0000	-2.0203	-0.4427	1.3528

2.0000	-3.0000	-2.0000	-1.6725	-0.2688	1.5267
2.0000	-3.0000	-1.0000	-1.3247	-0.0948	1.7006
2.0000	-3.0000	0.0000	-0.9768	0.0791	1.8745
2.0000	-3.0000	1.0000	-0.6290	0.2530	2.0484
2.0000	-3.0000	2.0000	-0.2811	0.4269	2.2224
2.0000	-3.0000	3.0000	0.0667	0.6009	2.3963
2.0000	-2.0000	-3.0000	-1.6947	-0.7683	1.0272
2.0000	-2.0000	-2.0000	-1.3469	-0.5944	1.2011
2.0000	-2.0000	-1.0000	-0.9990	-0.4204	1.3750
2.0000	-2.0000	0.0000	-0.6512	-0.2465	1.5489
2.0000	-2.0000	1.0000	-0.3034	-0.0726	1.7228
2.0000	-2.0000	2.0000	0.0445	0.1013	1.8968
2.0000	-2.0000	3.0000	0.3923	0.2753	2.0707
2.0000	-1.0000	-3.0000	-1.3691	-1.0939	0.7016
2.0000	-1.0000	-2.0000	-1.0213	-0.9200	0.8755
2.0000	-1.0000	-1.0000	-0.6734	-0.7460	1.0494
2.0000	-1.0000	0.0000	-0.3256	-0.5721	1.2233
2.0000	-1.0000	1.0000	0.0222	-0.3982	1.3972
2.0000	-1.0000	2.0000	0.3701	-0.2243	1.5712
2.0000	-1.0000	3.0000	0.7179	-0.0503	1.7451
2.0000	0.0000	-3.0000	-1.0435	-1.4195	0.3760
2.0000	0.0000	-2.0000	-0.6957	-1.2456	0.5499
2.0000	0.0000	-1.0000	-0.3478	-1.0716	0.7238
2.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.8977	0.8977
2.0000	0.0000	1.0000	0.3478	-0.7238	1.0716
2.0000	0.0000	2.0000	0.6957	-0.5499	1.2456
2.0000	0.0000	3.0000	1.0435	-0.3760	1.4195
2.0000	1.0000	-3.0000	-0.7179	-1.7451	0.0503
2.0000	1.0000	-2.0000	-0.3701	-1.5712	0.2243
2.0000	1.0000	-1.0000	-0.0222	-1.3972	0.3982
2.0000	1.0000	0.0000	0.3256	-1.2233	0.5721
2.0000	1.0000	1.0000	0.6734	-1.0494	0.7460
2.0000	1.0000	2.0000	1.0213	-0.8755	0.9200
2.0000	1.0000	3.0000	1.3691	-0.7016	1.0939
2.0000	2.0000	-3.0000	-0.3923	-2.0707	-0.2753
2.0000	2.0000	-2.0000	-0.0445	-1.8968	-0.1013
2.0000	2.0000	-1.0000	0.3034	-1.7228	0.0726
2.0000	2.0000	0.0000	0.6512	-1.5489	0.2465
2.0000	2.0000	1.0000	0.9990	-1.3750	0.4204
2.0000	2.0000	2.0000	1.3469	-1.2011	0.5944
2.0000	2.0000	3.0000	1.6947	-1.0272	0.7683
2.0000	3.0000	-3.0000	-0.0667	-2.3963	-0.6009
2.0000	3.0000	-2.0000	0.2811	-2.2224	-0.4269
2.0000	3.0000	-1.0000	0.6290	-2.0484	-0.2530
2.0000	3.0000	0.0000	0.9768	-1.8745	-0.0791
2.0000	3.0000	1.0000	1.3247	-1.7006	0.0948
2.0000	3.0000	2.0000	1.6725	-1.5267	0.2688
2.0000	3.0000	3.0000	2.0203	-1.3528	0.4427
3.0000	-3.0000	-3.0000	-2.0203	-0.8915	1.8016
3.0000	-3.0000	-2.0000	-1.6725	-0.7176	1.9755
3.0000	-3.0000	-1.0000	-1.3247	-0.5437	2.1495
3.0000	-3.0000	0.0000	-0.9768	-0.3698	2.3234
3.0000	-3.0000	1.0000	-0.6290	-0.1959	2.4973
3.0000	-3.0000	2.0000	-0.2811	-0.0219	2.6712
3.0000	-3.0000	3.0000	0.0667	0.1520	2.8452
3.0000	-2.0000	-3.0000	-1.6947	-1.2171	1.4760
3.0000	-2.0000	-2.0000	-1.3469	-1.0432	1.6499
3.0000	-2.0000	-1.0000	-0.9990	-0.8693	1.8239
3.0000	-2.0000	0.0000	-0.6512	-0.6954	1.9978
3.0000	-2.0000	1.0000	-0.3034	-0.5215	2.1717
3.0000	-2.0000	2.0000	0.0445	-0.3475	2.3456
3.0000	-2.0000	3.0000	0.3923	-0.1736	2.5196
3.0000	-1.0000	-3.0000	-1.3691	-1.5427	1.1504
3.0000	-1.0000	-2.0000	-1.0213	-1.3688	1.3243
3.0000	-1.0000	-1.0000	-0.6734	-1.1949	1.4983



3.0000	-1.0000	0.0000	-0.3256	-1.0210	1.6722
3.0000	-1.0000	1.0000	0.0222	-0.8471	1.8461
3.0000	-1.0000	2.0000	0.3701	-0.6731	2.0200
3.0000	-1.0000	3.0000	0.7179	-0.4992	2.1939
3.0000	0.0000	-3.0000	-1.0435	-1.8683	0.8248
3.0000	0.0000	-2.0000	-0.6957	-1.6944	0.9987
3.0000	0.0000	-1.0000	-0.3478	-1.5205	1.1727
3.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-1.3466	1.3466
3.0000	0.0000	1.0000	0.3478	-1.1727	1.5205
3.0000	0.0000	2.0000	0.6957	-0.9987	1.6944
3.0000	0.0000	3.0000	1.0435	-0.8248	1.8683
3.0000	1.0000	-3.0000	-0.7179	-2.1939	0.4992
3.0000	1.0000	-2.0000	-0.3701	-2.0200	0.6731
3.0000	1.0000	-1.0000	-0.0222	-1.8461	0.8471
3.0000	1.0000	0.0000	0.3256	-1.6722	1.0210
3.0000	1.0000	1.0000	0.6734	-1.4983	1.1949
3.0000	1.0000	2.0000	1.0213	-1.3243	1.3688
3.0000	1.0000	3.0000	1.3691	-1.1504	1.5427
3.0000	2.0000	-3.0000	-0.3923	-2.5196	0.1736
3.0000	2.0000	-2.0000	-0.0445	-2.3456	0.3475
3.0000	2.0000	-1.0000	0.3034	-2.1717	0.5215
3.0000	2.0000	0.0000	0.6512	-1.9978	0.6954
3.0000	2.0000	1.0000	0.9990	-1.8239	0.8693
3.0000	2.0000	2.0000	1.3469	-1.6499	1.0432
3.0000	2.0000	3.0000	1.6947	-1.4760	1.2171
3.0000	3.0000	-3.0000	-0.0667	-2.8452	-0.1520
3.0000	3.0000	-2.0000	0.2811	-2.6712	0.0219
3.0000	3.0000	-1.0000	0.6290	-2.4973	0.1959
3.0000	3.0000	0.0000	0.9768	-2.3234	0.3698
3.0000	3.0000	1.0000	1.3247	-2.1495	0.5437
3.0000	3.0000	2.0000	1.6725	-1.9755	0.7176
3.0000	3.0000	3.0000	2.0203	-1.8016	0.8915

[DIRECTION: CRYSTAL 1]

[DIRECTION: CRYSTAL 2]

-3.0000	-3.0000	-3.0000	-8.8209	3.5382	-3.1454
-3.0000	-3.0000	-2.0000	-6.9044	4.4965	-2.1871
-3.0000	-3.0000	-1.0000	-4.9878	5.4548	-1.2288
-3.0000	-3.0000	0.0000	-3.0712	6.4130	-0.2706
-3.0000	-3.0000	1.0000	-1.1547	7.3713	0.6877
-3.0000	-3.0000	2.0000	0.7619	8.3296	1.6460
-3.0000	-3.0000	3.0000	2.6784	9.2879	2.6043
-3.0000	-2.0000	-3.0000	-7.7972	2.5145	-4.1692
-3.0000	-2.0000	-2.0000	-5.8806	3.4727	-3.2109
-3.0000	-2.0000	-1.0000	-3.9640	4.4310	-2.2526
-3.0000	-2.0000	0.0000	-2.0475	5.3893	-1.2943
-3.0000	-2.0000	1.0000	-0.1309	6.3476	-0.3360
-3.0000	-2.0000	2.0000	1.7856	7.3059	0.6222
-3.0000	-2.0000	3.0000	3.7022	8.2641	1.5805
-3.0000	-1.0000	-3.0000	-6.7734	1.4907	-5.1929
-3.0000	-1.0000	-2.0000	-4.8569	2.4490	-4.2346
-3.0000	-1.0000	-1.0000	-2.9403	3.4073	-3.2763
-3.0000	-1.0000	0.0000	-1.0237	4.3655	-2.3181
-3.0000	-1.0000	1.0000	0.8928	5.3238	-1.3598
-3.0000	-1.0000	2.0000	2.8094	6.2821	-0.4015
-3.0000	-1.0000	3.0000	4.7259	7.2404	0.5568
-3.0000	0.0000	-3.0000	-5.7497	0.4670	-6.2166
-3.0000	0.0000	-2.0000	-3.8331	1.4252	-5.2584
-3.0000	0.0000	-1.0000	-1.9166	2.3835	-4.3001
-3.0000	0.0000	0.0000	0.0000	3.3418	-3.3418
-3.0000	0.0000	1.0000	1.9166	4.3001	-2.3835
-3.0000	0.0000	2.0000	3.8331	5.2584	-1.4252
-3.0000	0.0000	3.0000	5.7497	6.2166	-0.4670
-3.0000	1.0000	-3.0000	-4.7259	-0.5568	-7.2404

-3.0000	1.0000	-2.0000	-2.8094	0.4015	-6.2821
-3.0000	1.0000	-1.0000	-0.8928	1.3598	-5.3238
-3.0000	1.0000	0.0000	1.0237	2.3181	-4.3655
-3.0000	1.0000	1.0000	2.9403	3.2763	-3.4073
-3.0000	1.0000	2.0000	4.8569	4.2346	-2.4490
-3.0000	1.0000	3.0000	6.7734	5.1929	-1.4907
-3.0000	2.0000	-3.0000	-3.7022	-1.5805	-8.2641
-3.0000	2.0000	-2.0000	-1.7856	-0.6222	-7.3059
-3.0000	2.0000	-1.0000	0.1309	0.3360	-6.3476
-3.0000	2.0000	0.0000	2.0475	1.2943	-5.3893
-3.0000	2.0000	1.0000	3.9640	2.2526	-4.4310
-3.0000	2.0000	2.0000	5.8806	3.2109	-3.4727
-3.0000	2.0000	3.0000	7.7972	4.1692	-2.5145
-3.0000	3.0000	-3.0000	-2.6784	-2.6043	-9.2879
-3.0000	3.0000	-2.0000	-0.7619	-1.6460	-8.3296
-3.0000	3.0000	-1.0000	1.1547	-0.6877	-7.3713
-3.0000	3.0000	0.0000	3.0712	0.2706	-6.4130
-3.0000	3.0000	1.0000	4.9878	1.2288	-5.4548
-3.0000	3.0000	2.0000	6.9044	2.1871	-4.4965
-3.0000	3.0000	3.0000	8.8209	3.1454	-3.5382
-2.0000	-3.0000	-3.0000	-8.8209	2.4243	-2.0315
-2.0000	-3.0000	-2.0000	-6.9044	3.3825	-1.0732
-2.0000	-3.0000	-1.0000	-4.9878	4.3408	-0.1149
-2.0000	-3.0000	0.0000	-3.0712	5.2991	0.8434
-2.0000	-3.0000	1.0000	-1.1547	6.2574	1.8016
-2.0000	-3.0000	2.0000	0.7619	7.2157	2.7599
-2.0000	-3.0000	3.0000	2.6784	8.1739	3.7182
-2.0000	-2.0000	-3.0000	-7.7972	1.4005	-3.0552
-2.0000	-2.0000	-2.0000	-5.8806	2.3588	-2.0969
-2.0000	-2.0000	-1.0000	-3.9640	3.3171	-1.1387
-2.0000	-2.0000	0.0000	-2.0475	4.2754	-0.1804
-2.0000	-2.0000	1.0000	-0.1309	5.2336	0.7779
-2.0000	-2.0000	2.0000	1.7856	6.1919	1.7362
-2.0000	-2.0000	3.0000	3.7022	7.1502	2.6945
-2.0000	-1.0000	-3.0000	-6.7734	0.3768	-4.0790
-2.0000	-1.0000	-2.0000	-4.8569	1.3351	-3.1207
-2.0000	-1.0000	-1.0000	-2.9403	2.2933	-2.1624
-2.0000	-1.0000	0.0000	-1.0237	3.2516	-1.2041
-2.0000	-1.0000	1.0000	0.8928	4.2099	-0.2458
-2.0000	-1.0000	2.0000	2.8094	5.1682	0.7124
-2.0000	-1.0000	3.0000	4.7259	6.1265	1.6707
-2.0000	0.0000	-3.0000	-5.7497	-0.6470	-5.1027
-2.0000	0.0000	-2.0000	-3.8331	0.3113	-4.1444
-2.0000	0.0000	-1.0000	-1.9166	1.2696	-3.1861
-2.0000	0.0000	0.0000	0.0000	2.2279	-2.2279
-2.0000	0.0000	1.0000	1.9166	3.1861	-1.2696
-2.0000	0.0000	2.0000	3.8331	4.1444	-0.3113
-2.0000	0.0000	3.0000	5.7497	5.1027	0.6470
-2.0000	1.0000	-3.0000	-4.7259	-1.6707	-6.1265
-2.0000	1.0000	-2.0000	-2.8094	-0.7124	-5.1682
-2.0000	1.0000	-1.0000	-0.8928	0.2458	-4.2099
-2.0000	1.0000	0.0000	1.0237	1.2041	-3.2516
-2.0000	1.0000	1.0000	2.9403	2.1624	-2.2933
-2.0000	1.0000	2.0000	4.8569	3.1207	-1.3351
-2.0000	1.0000	3.0000	6.7734	4.0790	-0.3768
-2.0000	2.0000	-3.0000	-3.7022	-2.6945	-7.1502
-2.0000	2.0000	-2.0000	-1.7856	-1.7362	-6.1919
-2.0000	2.0000	-1.0000	0.1309	-0.7779	-5.2336
-2.0000	2.0000	0.0000	2.0475	0.1804	-4.2754
-2.0000	2.0000	1.0000	3.9640	1.1387	-3.3171
-2.0000	2.0000	2.0000	5.8806	2.0969	-2.3588
-2.0000	2.0000	3.0000	7.7972	3.0552	-1.4005
-2.0000	3.0000	-3.0000	-2.6784	-3.7182	-8.1739
-2.0000	3.0000	-2.0000	-0.7619	-2.7599	-7.2157
-2.0000	3.0000	-1.0000	1.1547	-1.8016	-6.2574

-2.0000	3.0000	0.0000	3.0712	-0.8434	-5.2991
-2.0000	3.0000	1.0000	4.9878	0.1149	-4.3408
-2.0000	3.0000	2.0000	6.9044	1.0732	-3.3825
-2.0000	3.0000	3.0000	8.8209	2.0315	-2.4243
-1.0000	-3.0000	-3.0000	-8.8209	1.3103	-0.9175
-1.0000	-3.0000	-2.0000	-6.9044	2.2686	0.0407
-1.0000	-3.0000	-1.0000	-4.9878	3.2269	0.9990
-1.0000	-3.0000	0.0000	-3.0712	4.1852	1.9573
-1.0000	-3.0000	1.0000	-1.1547	5.1434	2.9156
-1.0000	-3.0000	2.0000	0.7619	6.1017	3.8739
-1.0000	-3.0000	3.0000	2.6784	7.0600	4.8321
-1.0000	-2.0000	-3.0000	-7.7972	0.2866	-1.9413
-1.0000	-2.0000	-2.0000	-5.8806	1.2449	-0.9830
-1.0000	-2.0000	-1.0000	-3.9640	2.2031	-0.0247
-1.0000	-2.0000	0.0000	-2.0475	3.1614	0.9336
-1.0000	-2.0000	1.0000	-0.1309	4.1197	1.8918
-1.0000	-2.0000	2.0000	1.7856	5.0780	2.8501
-1.0000	-2.0000	3.0000	3.7022	6.0363	3.8084
-1.0000	-1.0000	-3.0000	-6.7734	-0.7372	-2.9650
-1.0000	-1.0000	-2.0000	-4.8569	0.2211	-2.0067
-1.0000	-1.0000	-1.0000	-2.9403	1.1794	-1.0485
-1.0000	-1.0000	0.0000	-1.0237	2.1377	-0.0902
-1.0000	-1.0000	1.0000	0.8928	3.0960	0.8681
-1.0000	-1.0000	2.0000	2.8094	4.0542	1.8264
-1.0000	-1.0000	3.0000	4.7259	5.0125	2.7847
-1.0000	0.0000	-3.0000	-5.7497	-1.7609	-3.9888
-1.0000	0.0000	-2.0000	-3.8331	-0.8026	-3.0305
-1.0000	0.0000	-1.0000	-1.9166	0.1557	-2.0722
-1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.1139	-1.1139
-1.0000	0.0000	1.0000	1.9166	2.0722	-0.1557
-1.0000	0.0000	2.0000	3.8331	3.0305	0.8026
-1.0000	0.0000	3.0000	5.7497	3.9888	1.7609
-1.0000	1.0000	-3.0000	-4.7259	-2.7847	-5.0125
-1.0000	1.0000	-2.0000	-2.8094	-1.8264	-4.0542
-1.0000	1.0000	-1.0000	-0.8928	-0.8681	-3.0960
-1.0000	1.0000	0.0000	1.0237	0.0902	-2.1377
-1.0000	1.0000	1.0000	2.9403	1.0485	-1.1794
-1.0000	1.0000	2.0000	4.8569	2.0067	-0.2211
-1.0000	1.0000	3.0000	6.7734	2.9650	0.7372
-1.0000	2.0000	-3.0000	-3.7022	-3.8084	-6.0363
-1.0000	2.0000	-2.0000	-1.7856	-2.8501	-5.0780
-1.0000	2.0000	-1.0000	0.1309	-1.8918	-4.1197
-1.0000	2.0000	0.0000	2.0475	-0.9336	-3.1614
-1.0000	2.0000	1.0000	3.9640	0.0247	-2.2031
-1.0000	2.0000	2.0000	5.8806	0.9830	-1.2449
-1.0000	2.0000	3.0000	7.7972	1.9413	-0.2866
-1.0000	3.0000	-3.0000	-2.6784	-4.8321	-7.0600
-1.0000	3.0000	-2.0000	-0.7619	-3.8739	-6.1017
-1.0000	3.0000	-1.0000	1.1547	-2.9156	-5.1434
-1.0000	3.0000	0.0000	3.0712	-1.9573	-4.1852
-1.0000	3.0000	1.0000	4.9878	-0.9990	-3.2269
-1.0000	3.0000	2.0000	6.9044	-0.0407	-2.2686
-1.0000	3.0000	3.0000	8.8209	0.9175	-1.3103
0.0000	-3.0000	-3.0000	-8.8209	0.1964	0.1964
0.0000	-3.0000	-2.0000	-6.9044	1.1547	1.1547
0.0000	-3.0000	-1.0000	-4.9878	2.1130	2.1130
0.0000	-3.0000	0.0000	-3.0712	3.0712	3.0712
0.0000	-3.0000	1.0000	-1.1547	4.0295	4.0295
0.0000	-3.0000	2.0000	0.7619	4.9878	4.9878
0.0000	-3.0000	3.0000	2.6784	5.9461	5.9461
0.0000	-2.0000	-3.0000	-7.7972	-0.8274	-0.8274
0.0000	-2.0000	-2.0000	-5.8806	0.1309	0.1309
0.0000	-2.0000	-1.0000	-3.9640	1.0892	1.0892
0.0000	-2.0000	0.0000	-2.0475	2.0475	2.0475
0.0000	-2.0000	1.0000	-0.1309	3.0058	3.0058

0.0000	-2.0000	2.0000	1.7856	3.9640	3.9640
0.0000	-2.0000	3.0000	3.7022	4.9223	4.9223
0.0000	-1.0000	-3.0000	-6.7734	-1.8511	-1.8511
0.0000	-1.0000	-2.0000	-4.8569	-0.8928	-0.8928
0.0000	-1.0000	-1.0000	-2.9403	0.0655	0.0655
0.0000	-1.0000	0.0000	-1.0237	1.0237	1.0237
0.0000	-1.0000	1.0000	0.8928	1.9820	1.9820
0.0000	-1.0000	2.0000	2.8094	2.9403	2.9403
0.0000	-1.0000	3.0000	4.7259	3.8986	3.8986
0.0000	0.0000	-3.0000	-5.7497	-2.8748	-2.8748
0.0000	0.0000	-2.0000	-3.8331	-1.9166	-1.9166
0.0000	0.0000	-1.0000	-1.9166	-0.9583	-0.9583
0.0000	0.0000	1.0000	1.9166	0.9583	0.9583
0.0000	0.0000	2.0000	3.8331	1.9166	1.9166
0.0000	0.0000	3.0000	5.7497	2.8748	2.8748
0.0000	1.0000	-3.0000	-4.7259	-3.8986	-3.8986
0.0000	1.0000	-2.0000	-2.8094	-2.9403	-2.9403
0.0000	1.0000	-1.0000	-0.8928	-1.9820	-1.9820
0.0000	1.0000	0.0000	1.0237	-1.0237	-1.0237
0.0000	1.0000	1.0000	2.9403	-0.0655	-0.0655
0.0000	1.0000	2.0000	4.8569	0.8928	0.8928
0.0000	1.0000	3.0000	6.7734	1.8511	1.8511
0.0000	2.0000	-3.0000	-3.7022	-4.9223	-4.9223
0.0000	2.0000	-2.0000	-1.7856	-3.9640	-3.9640
0.0000	2.0000	-1.0000	0.1309	-3.0058	-3.0058
0.0000	2.0000	0.0000	2.0475	-2.0475	-2.0475
0.0000	2.0000	1.0000	3.9640	-1.0892	-1.0892
0.0000	2.0000	2.0000	5.8806	-0.1309	-0.1309
0.0000	2.0000	3.0000	7.7972	0.8274	0.8274
0.0000	3.0000	-3.0000	-2.6784	-5.9461	-5.9461
0.0000	3.0000	-2.0000	-0.7619	-4.9878	-4.9878
0.0000	3.0000	-1.0000	1.1547	-4.0295	-4.0295
0.0000	3.0000	0.0000	3.0712	-3.0712	-3.0712
0.0000	3.0000	1.0000	4.9878	-2.1130	-2.1130
0.0000	3.0000	2.0000	6.9044	-1.1547	-1.1547
0.0000	3.0000	3.0000	8.8209	-0.1964	-0.1964
1.0000	-3.0000	-3.0000	-8.8209	-0.9175	1.3103
1.0000	-3.0000	-2.0000	-6.9044	0.0407	2.2686
1.0000	-3.0000	-1.0000	-4.9878	0.9990	3.2269
1.0000	-3.0000	0.0000	-3.0712	1.9573	4.1852
1.0000	-3.0000	1.0000	-1.1547	2.9156	5.1434
1.0000	-3.0000	2.0000	0.7619	3.8739	6.1017
1.0000	-3.0000	3.0000	2.6784	4.8321	7.0600
1.0000	-2.0000	-3.0000	-7.7972	-1.9413	0.2866
1.0000	-2.0000	-2.0000	-5.8806	-0.9830	1.2449
1.0000	-2.0000	-1.0000	-3.9640	-0.0247	2.2031
1.0000	-2.0000	0.0000	-2.0475	0.9336	3.1614
1.0000	-2.0000	1.0000	-0.1309	1.8918	4.1197
1.0000	-2.0000	2.0000	1.7856	2.8501	5.0780
1.0000	-2.0000	3.0000	3.7022	3.8084	6.0363
1.0000	-1.0000	-3.0000	-6.7734	-2.9650	-0.7372
1.0000	-1.0000	-2.0000	-4.8569	-2.0067	0.2211
1.0000	-1.0000	-1.0000	-2.9403	-1.0485	1.1794
1.0000	-1.0000	0.0000	-1.0237	-0.0902	2.1377
1.0000	-1.0000	1.0000	0.8928	0.8681	3.0960
1.0000	-1.0000	2.0000	2.8094	1.8264	4.0542
1.0000	-1.0000	3.0000	4.7259	2.7847	5.0125
1.0000	0.0000	-3.0000	-5.7497	-3.9888	-1.7609
1.0000	0.0000	-2.0000	-3.8331	-3.0305	-0.8026
1.0000	0.0000	-1.0000	-1.9166	-2.0722	0.1557
1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-1.1139	1.1139
1.0000	0.0000	1.0000	1.9166	-0.1557	2.0722
1.0000	0.0000	2.0000	3.8331	0.8026	3.0305
1.0000	0.0000	3.0000	5.7497	1.7609	3.9888
1.0000	1.0000	-3.0000	-4.7259	-5.0125	-2.7847

1.0000	1.0000	-2.0000	-2.8094	-4.0542	-1.8264
1.0000	1.0000	-1.0000	-0.8928	-3.0960	-0.8681
1.0000	1.0000	0.0000	1.0237	-2.1377	0.0902
1.0000	1.0000	1.0000	2.9403	-1.1794	1.0485
1.0000	1.0000	2.0000	4.8569	-0.2211	2.0067
1.0000	1.0000	3.0000	6.7734	0.7372	2.9650
1.0000	2.0000	-3.0000	-3.7022	-6.0363	-3.8084
1.0000	2.0000	-2.0000	-1.7856	-5.0780	-2.8501
1.0000	2.0000	-1.0000	0.1309	-4.1197	-1.8918
1.0000	2.0000	0.0000	2.0475	-3.1614	-0.9336
1.0000	2.0000	1.0000	3.9640	-2.2031	0.0247
1.0000	2.0000	2.0000	5.8806	-1.2449	0.9830
1.0000	2.0000	3.0000	7.7972	-0.2866	1.9413
1.0000	3.0000	-3.0000	-2.6784	-7.0600	-4.8321
1.0000	3.0000	-2.0000	-0.7619	-6.1017	-3.8739
1.0000	3.0000	-1.0000	1.1547	-5.1434	-2.9156
1.0000	3.0000	0.0000	3.0712	-4.1852	-1.9573
1.0000	3.0000	1.0000	4.9878	-3.2269	-0.9990
1.0000	3.0000	2.0000	6.9044	-2.2686	-0.0407
1.0000	3.0000	3.0000	8.8209	-1.3103	0.9175
2.0000	-3.0000	-3.0000	-8.8209	-2.0315	2.4243
2.0000	-3.0000	-2.0000	-6.9044	-1.0732	3.3825
2.0000	-3.0000	-1.0000	-4.9878	-0.1149	4.3408
2.0000	-3.0000	0.0000	-3.0712	0.8434	5.2991
2.0000	-3.0000	1.0000	-1.1547	1.8016	6.2574
2.0000	-3.0000	2.0000	0.7619	2.7599	7.2157
2.0000	-3.0000	3.0000	2.6784	3.7182	8.1739
2.0000	-2.0000	-3.0000	-7.7972	-3.0552	1.4005
2.0000	-2.0000	-2.0000	-5.8806	-2.0969	2.3588
2.0000	-2.0000	-1.0000	-3.9640	-1.1387	3.3171
2.0000	-2.0000	0.0000	-2.0475	-0.1804	4.2754
2.0000	-2.0000	1.0000	-0.1309	0.7779	5.2336
2.0000	-2.0000	2.0000	1.7856	1.7362	6.1919
2.0000	-2.0000	3.0000	3.7022	2.6945	7.1502
2.0000	-1.0000	-3.0000	-6.7734	-4.0790	0.3768
2.0000	-1.0000	-2.0000	-4.8569	-3.1207	1.3351
2.0000	-1.0000	-1.0000	-2.9403	-2.1624	2.2933
2.0000	-1.0000	0.0000	-1.0237	-1.2041	3.2516
2.0000	-1.0000	1.0000	0.8928	-0.2458	4.2099
2.0000	-1.0000	2.0000	2.8094	0.7124	5.1682
2.0000	-1.0000	3.0000	4.7259	1.6707	6.1265
2.0000	0.0000	-3.0000	-5.7497	-5.1027	-0.6470
2.0000	0.0000	-2.0000	-3.8331	-4.1444	0.3113
2.0000	0.0000	-1.0000	-1.9166	-3.1861	1.2696
2.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-2.2279	2.2279
2.0000	0.0000	1.0000	1.9166	-1.2696	3.1861
2.0000	0.0000	2.0000	3.8331	-0.3113	4.1444
2.0000	0.0000	3.0000	5.7497	0.6470	5.1027
2.0000	1.0000	-3.0000	-4.7259	-6.1265	-1.6707
2.0000	1.0000	-2.0000	-2.8094	-5.1682	-0.7124
2.0000	1.0000	-1.0000	-0.8928	-4.2099	0.2458
2.0000	1.0000	0.0000	1.0237	-3.2516	1.2041
2.0000	1.0000	1.0000	2.9403	-2.2933	2.1624
2.0000	1.0000	2.0000	4.8569	-1.3351	3.1207
2.0000	1.0000	3.0000	6.7734	-0.3768	4.0790
2.0000	2.0000	-3.0000	-3.7022	-7.1502	-2.6945
2.0000	2.0000	-2.0000	-1.7856	-6.1919	-1.7362
2.0000	2.0000	-1.0000	0.1309	-5.2336	-0.7779
2.0000	2.0000	0.0000	2.0475	-4.2754	0.1804
2.0000	2.0000	1.0000	3.9640	-3.3171	1.1387
2.0000	2.0000	2.0000	5.8806	-2.3588	2.0969
2.0000	2.0000	3.0000	7.7972	-1.4005	3.0552
2.0000	3.0000	-3.0000	-2.6784	-8.1739	-3.7182
2.0000	3.0000	-2.0000	-0.7619	-7.2157	-2.7599
2.0000	3.0000	-1.0000	1.1547	-6.2574	-1.8016

2.0000	3.0000	0.0000	3.0712	-5.2991	-0.8434
2.0000	3.0000	1.0000	4.9878	-4.3408	0.1149
2.0000	3.0000	2.0000	6.9044	-3.3825	1.0732
2.0000	3.0000	3.0000	8.8209	-2.4243	2.0315
3.0000	-3.0000	-3.0000	-8.8209	-3.1454	3.5382
3.0000	-3.0000	-2.0000	-6.9044	-2.1871	4.4965
3.0000	-3.0000	-1.0000	-4.9878	-1.2288	5.4548
3.0000	-3.0000	0.0000	-3.0712	-0.2706	6.4130
3.0000	-3.0000	1.0000	-1.1547	0.6877	7.3713
3.0000	-3.0000	2.0000	0.7619	1.6460	8.3296
3.0000	-3.0000	3.0000	2.6784	2.6043	9.2879
3.0000	-2.0000	-3.0000	-7.7972	-4.1692	2.5145
3.0000	-2.0000	-2.0000	-5.8806	-3.2109	3.4727
3.0000	-2.0000	-1.0000	-3.9640	-2.2526	4.4310
3.0000	-2.0000	0.0000	-2.0475	-1.2943	5.3893
3.0000	-2.0000	1.0000	-0.1309	-0.3360	6.3476
3.0000	-2.0000	2.0000	1.7856	0.6222	7.3059
3.0000	-2.0000	3.0000	3.7022	1.5805	8.2641
3.0000	-1.0000	-3.0000	-6.7734	-5.1929	1.4907
3.0000	-1.0000	-2.0000	-4.8569	-4.2346	2.4490
3.0000	-1.0000	-1.0000	-2.9403	-3.2763	3.4073
3.0000	-1.0000	0.0000	-1.0237	-2.3181	4.3655
3.0000	-1.0000	1.0000	0.8928	-1.3598	5.3238
3.0000	-1.0000	2.0000	2.8094	-0.4015	6.2821
3.0000	-1.0000	3.0000	4.7259	0.5568	7.2404
3.0000	0.0000	-3.0000	-5.7497	-6.2166	0.4670
3.0000	0.0000	-2.0000	-3.8331	-5.2584	1.4252
3.0000	0.0000	-1.0000	-1.9166	-4.3001	2.3835
3.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-3.3418	3.3418
3.0000	0.0000	1.0000	1.9166	-2.3835	4.3001
3.0000	0.0000	2.0000	3.8331	-1.4252	5.2584
3.0000	0.0000	3.0000	5.7497	-0.4670	6.2166
3.0000	1.0000	-3.0000	-4.7259	-7.2404	-0.5568
3.0000	1.0000	-2.0000	-2.8094	-6.2821	0.4015
3.0000	1.0000	-1.0000	-0.8928	-5.3238	1.3598
3.0000	1.0000	0.0000	1.0237	-4.3655	2.3181
3.0000	1.0000	1.0000	2.9403	-3.4073	3.2763
3.0000	1.0000	2.0000	4.8569	-2.4490	4.2346
3.0000	1.0000	3.0000	6.7734	-1.4907	5.1929
3.0000	2.0000	-3.0000	-3.7022	-8.2641	-1.5805
3.0000	2.0000	-2.0000	-1.7856	-7.3059	-0.6222
3.0000	2.0000	-1.0000	0.1309	-6.3476	0.3360
3.0000	2.0000	0.0000	2.0475	-5.3893	1.2943
3.0000	2.0000	1.0000	3.9640	-4.4310	2.2526
3.0000	2.0000	2.0000	5.8806	-3.4727	3.2109
3.0000	2.0000	3.0000	7.7972	-2.5145	4.1692
3.0000	3.0000	-3.0000	-2.6784	-9.2879	-2.6043
3.0000	3.0000	-2.0000	-0.7619	-8.3296	-1.6460
3.0000	3.0000	-1.0000	1.1547	-7.3713	-0.6877
3.0000	3.0000	0.0000	3.0712	-6.4130	0.2706
3.0000	3.0000	1.0000	4.9878	-5.4548	1.2288
3.0000	3.0000	2.0000	6.9044	-4.4965	2.1871
3.0000	3.0000	3.0000	8.8209	-3.5382	3.1454

Study any particular vector in detail? (0 = No, 1 = Yes)

1

Components of VECTOR ?

1 0 0

Components REAL( =0) or RECIPROCAL( =1) ?

1

Which CRYSTAL is the VECTOR from (1 or 2)?

2

Reciprocal space VECTOR: CRYSTAL 2= 1.0000 0.0000 0.0000  
parallel to reciprocal space VECTOR: CRYSTAL 1= 0.0000 1.0237 1.9166

Study any particular vector in detail? (0 = No, 1 = Yes)