

# Reducibility of Cu-zeolites and stability of Cu<sup>+</sup> monocarbonyl adducts: qualitative and quantitative relationships from MCR-XAS and DFT

Gabriele Deplano<sup>1</sup>, Matteo Signorile<sup>1</sup>, Cesare Atzori<sup>2</sup>, Davide Salusso<sup>2</sup>, Elisa Borfecchia<sup>1</sup>, Valentina Crocellà<sup>1</sup>, and Silvia Bordiga<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, NIS and INSTM Reference Centre, Università di Torino, Via P. Giuria 7, 10125 and Via G. Quarello 15/A, 10135 Torino, TO, Italy

<sup>2</sup>European Synchrotron Radiation Facility, 71 Avenue des Martyrs, CS 40220, 38043 Grenoble Cedex 9, France

## Supporting information

### 1. Details on the volumetric apparatus

The cell that has been employed for volumetric measurements is shown in **Figure S1**. It is composed of a quartz burette that contains the sample, linked to a valve that can be connected to a vacuum line enabling thermochemical treatment and exposure to different reactants in the gas phase. The sample environment can be inserted in a thermal jacket that can be filled with a thermostatic fluid, allowing for precise isothermal conditions.



*Figure S1. Picture of the cell employed for isothermal volumetric adsorption measurements. Italian patent application n°10202000005014 filed on March 9<sup>th</sup>, 2020 and PCT n. PCT/IB2021/051769 filed on March 3<sup>rd</sup>, 2021.*

## 2. Reaction protocol

Figure S2 reports the thermochemical treatment employed for all samples during XAS acquisition.

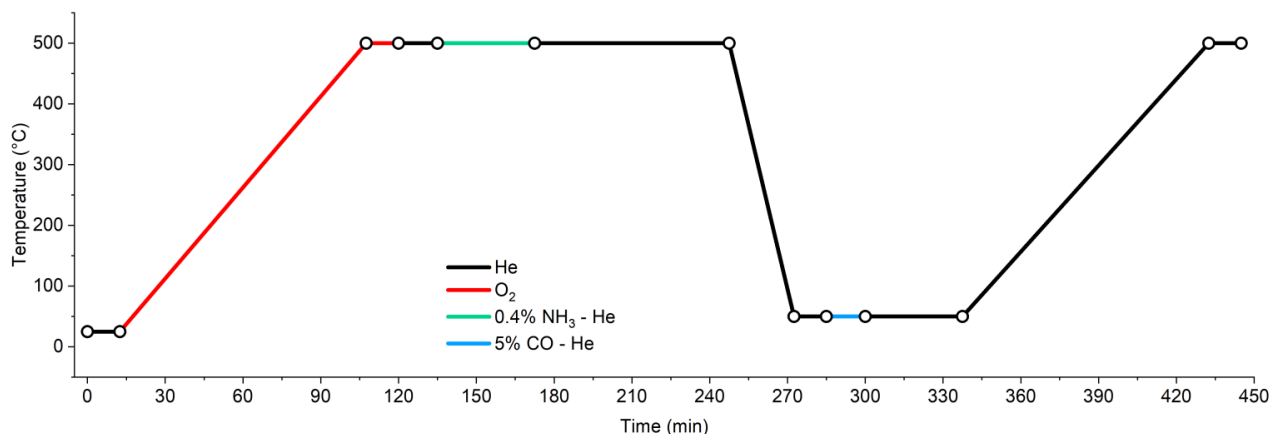


Figure S2. Thermochemical treatment employed for all Cu-zeolites during XAS acquisition.

## 3. Comparison of XANES and EXAFS spectra at fully reduced state with a Cu metal foil

Figure S3 compares the XANES and EXAFS spectra of all Cu-zeolite samples at their fully reduced state with a Cu metal foil.

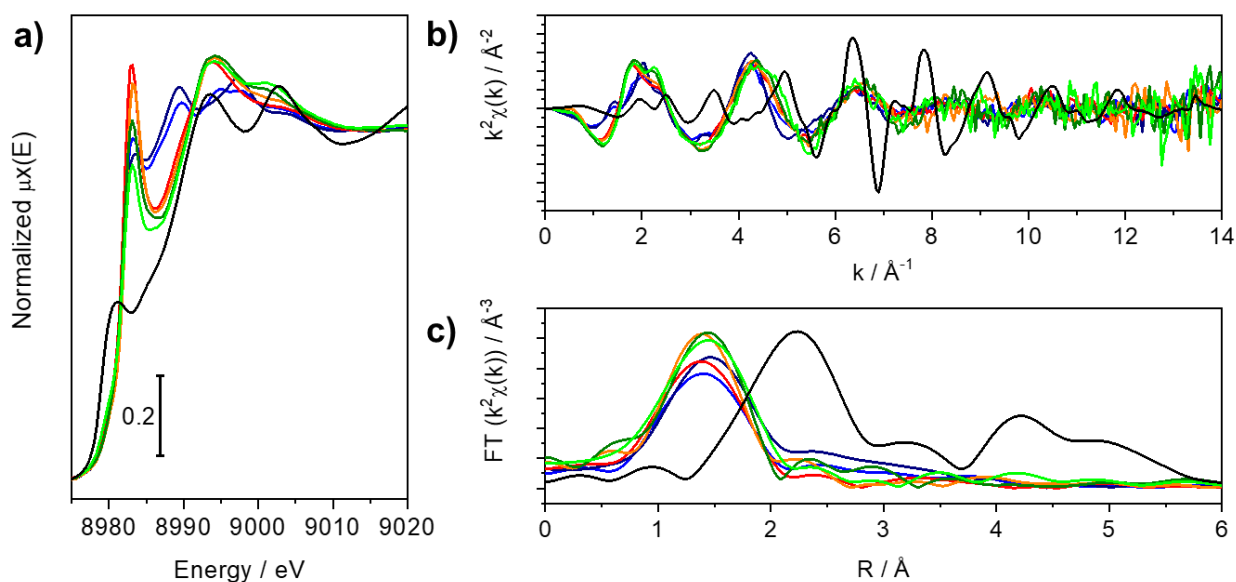


Figure S3. a) Normalized XANES; b) raw  $k$ -space and c) magnitude of FT-EXAFS spectra of all samples, including a Cu metal foil. FT transform of EXAFS signal has been performed in the 2-8  $\text{\AA}^{-1}$  range. Colour code: blue, (0.48)Cu-CHA(15); navy, (0.35)Cu-CHA(5); red, (0.32)Cu-MOR(11); orange, (0.21)Cu-MOR(6.5); light green, (0.48)Cu-MFI(25); olive, (0.35)Cu-MFI(11.5); black, Cu

metal foil. EXAFS spectra of Cu metal foil have been rescaled by multiplying them by a factor 0.25 for the sake of better visualization.

Despite the evident differences in the XANES spectra across the different zeolite samples (Figure S3a), it is evident that the metal state possesses well-distinguished features (such as the pre-edge transition at 8981 eV and a highly structured whiteline), never observed in our dataset. A further confirmation comes from the FT-EXAFS spectra (Figure S3c), where all Cu-zeolites exhibit a closely identical shape, testifying a very similar local environment in terms of radial distribution of neighbours. Finally, the typical peaks associated to Cu-Cu distances with first (2.5 Å) and second (4.2 Å) neighbours in the FT-EXAFS of the metal foil are not present in any of the samples.

#### 4. Reaction steps at 500°C: MCR-ALS

MCR-ALS analysis was performed on the steps at 500°C described in the main text (Figure 2). The algorithm was applied using the same constraints that were previously described.

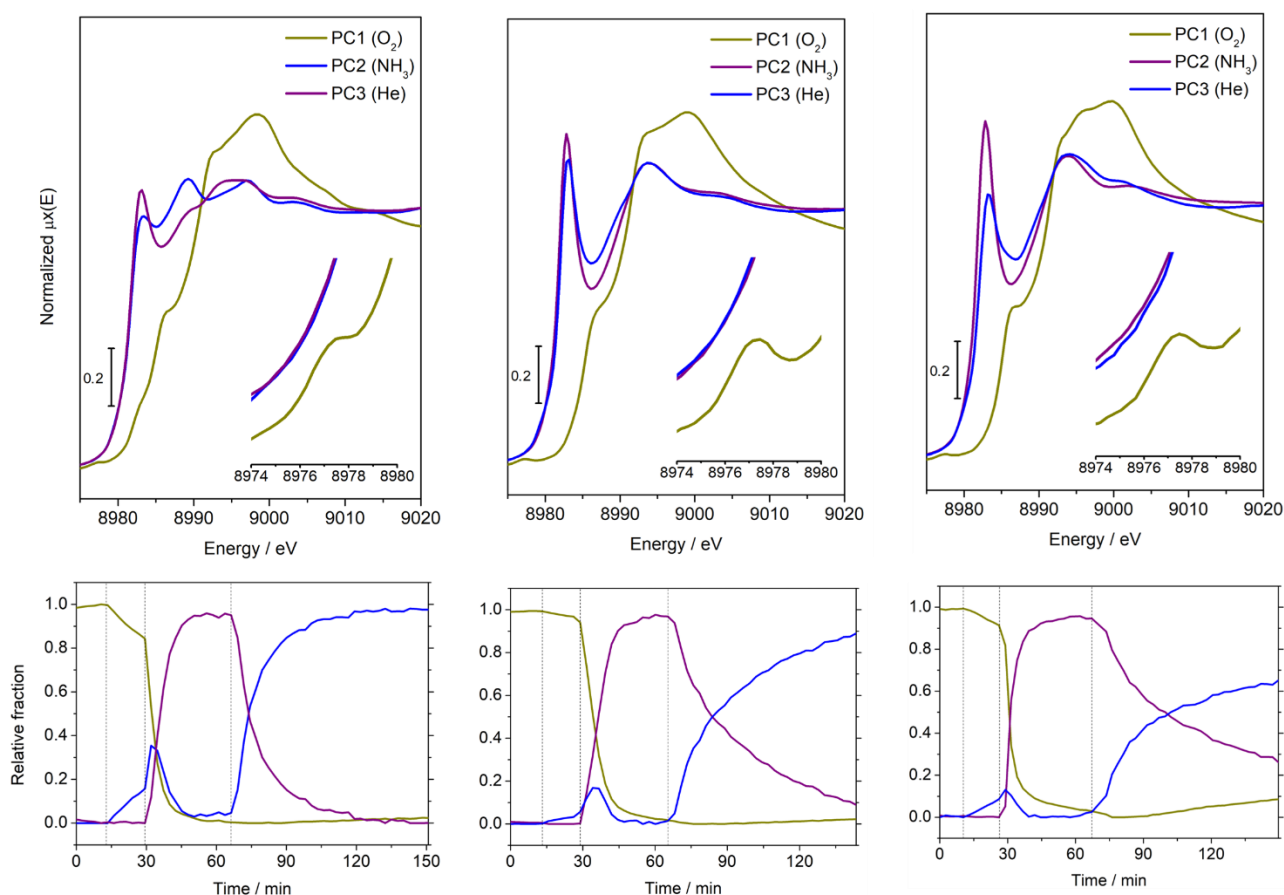


Figure S4: Pure spectral (top) and concentration (bottom) profiles extracted by MCR-ALS on (0.35)Cu-CHA(5), (0.32)Cu-MOR(11) and (0.35)Cu-MFI(11.5) (from left to right) during the steps at 500 °C described in Figure 2. Insets: zoom on the 1s-3d transition zone of the edge.

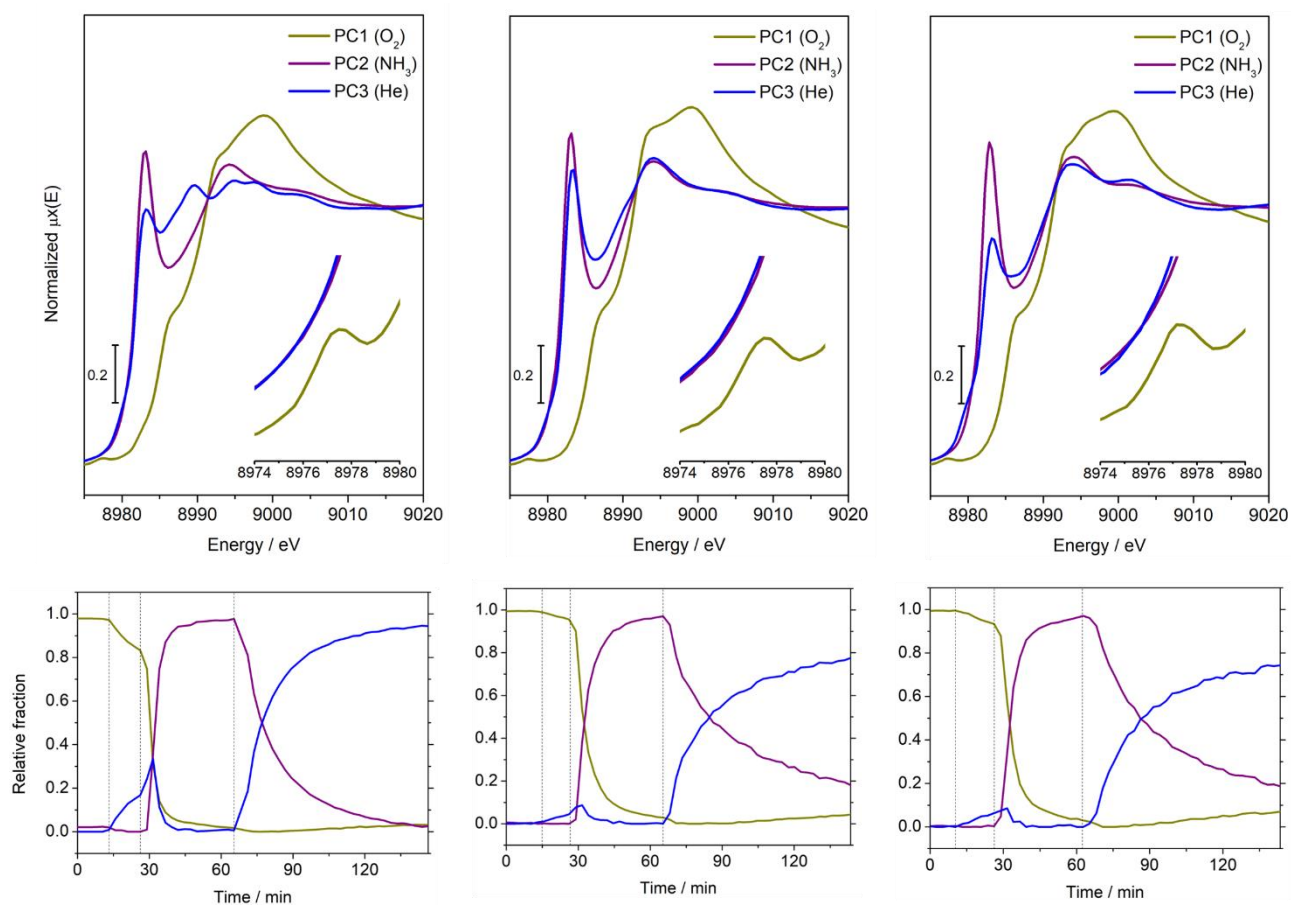


Figure S5: Pure spectral (top) and concentration (bottom) profiles extracted by MCR-ALS on (0.48)Cu-CHA(15), (0.21)Cu-MOR(6.5) and (0.48)Cu-MFI(25) (from left to right) during the steps at 500°C described in Figure 2. Insets: zoom on the 1s-3d transition zone of the edge.

## 5. NH<sub>3</sub> desorption: MCR-ALS

Comparative results on the concentration profile for NH<sub>3</sub> desorption at 500°C (*vide supra*) are reported in **Figure S5**.

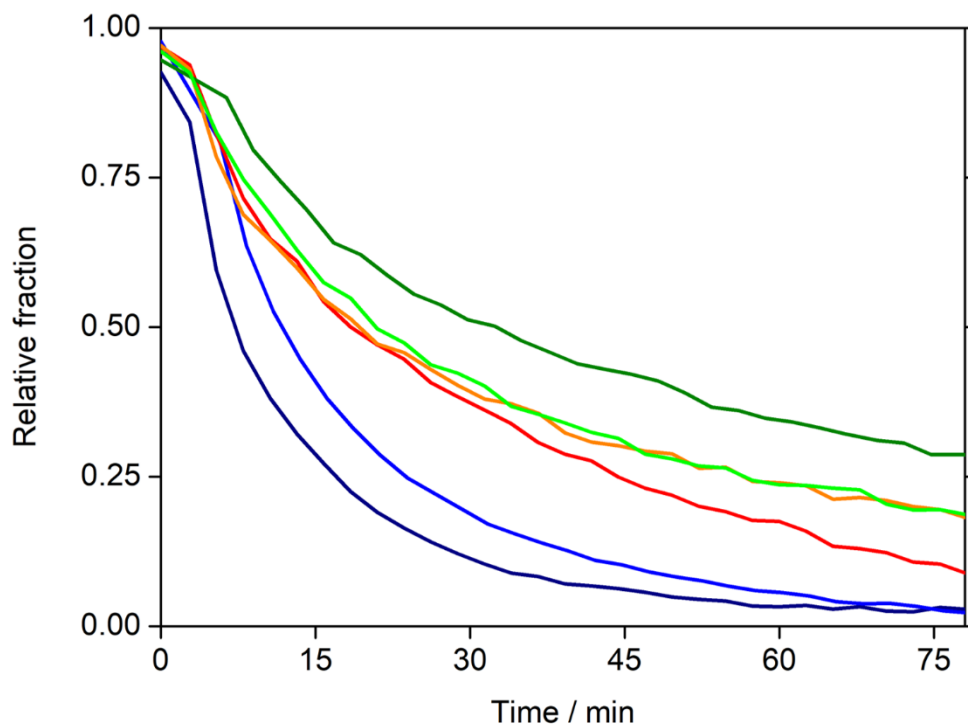
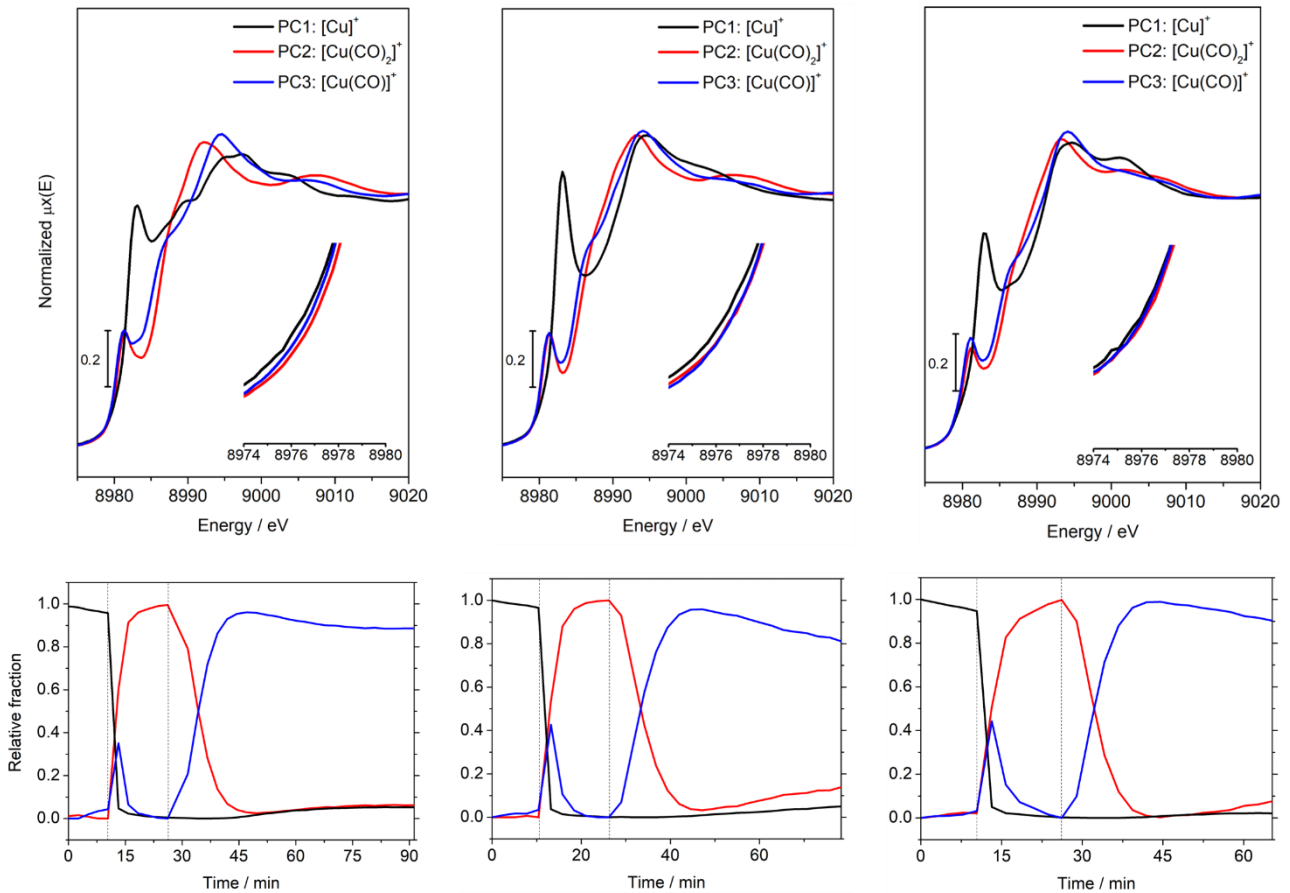


Figure S6. NH<sub>3</sub> desorption profiles as extracted by MCR-ALS analysis performed on the series of spectra presented in Figure 2 of the main text. Colour code: blue, (0.48)Cu-CHA(15); navy, (0.35)Cu-CHA(5); red, (0.32)Cu-MOR(11); orange, (0.21)Cu-MOR(6.5); light green, (0.48)Cu-MFI(25); olive, (0.35)Cu-MFI(11.5).

## 6. Reaction steps at 50°C: MCR-ALS

MCR-ALS analysis was performed on the steps at 50°C described in the main text (**Figure 3**) on the samples not included in the discussion in Section 3.2. The algorithm was applied using the same constraints that were previously described.



*Figure S7: Pure spectral (top) and concentration (bottom) profiles extracted by MCR-ALS on (0.48)Cu-CHA(15), (0.21)Cu-MOR(6.5) and (0.48)Cu-MFI(25) (from left to right) during the steps at 50°C described in Figure 3. Insets: zoom on the 1s-3d transition zone of the edge.*

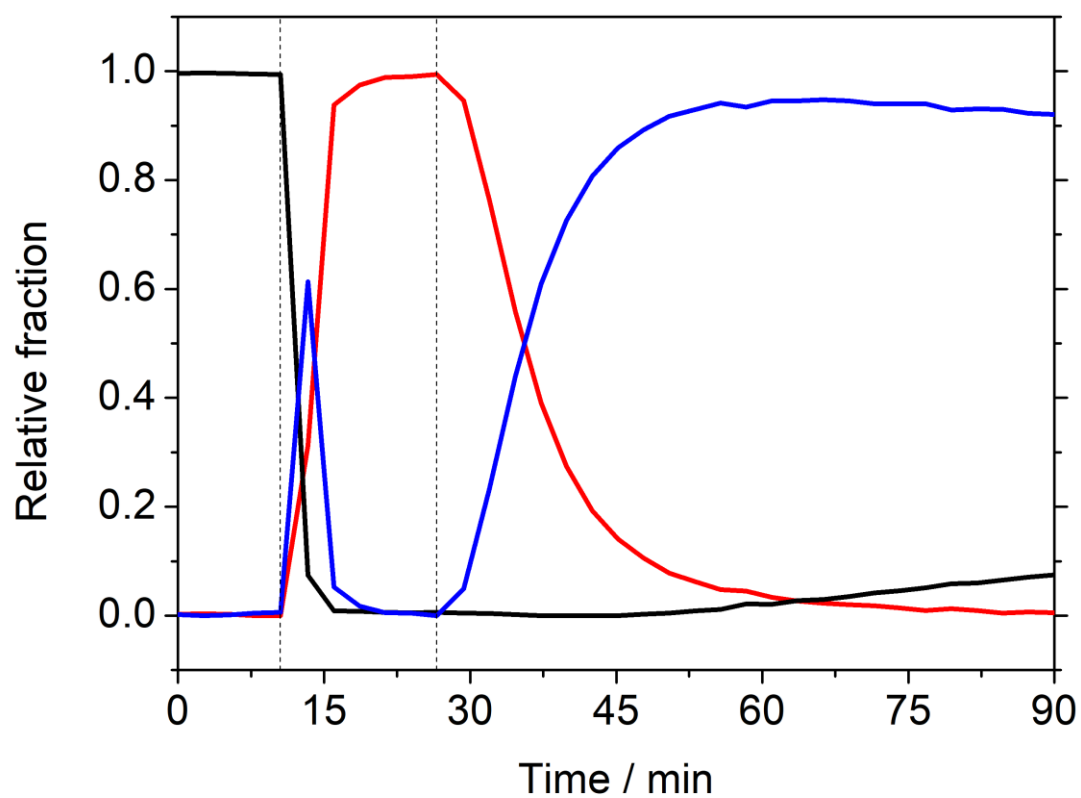
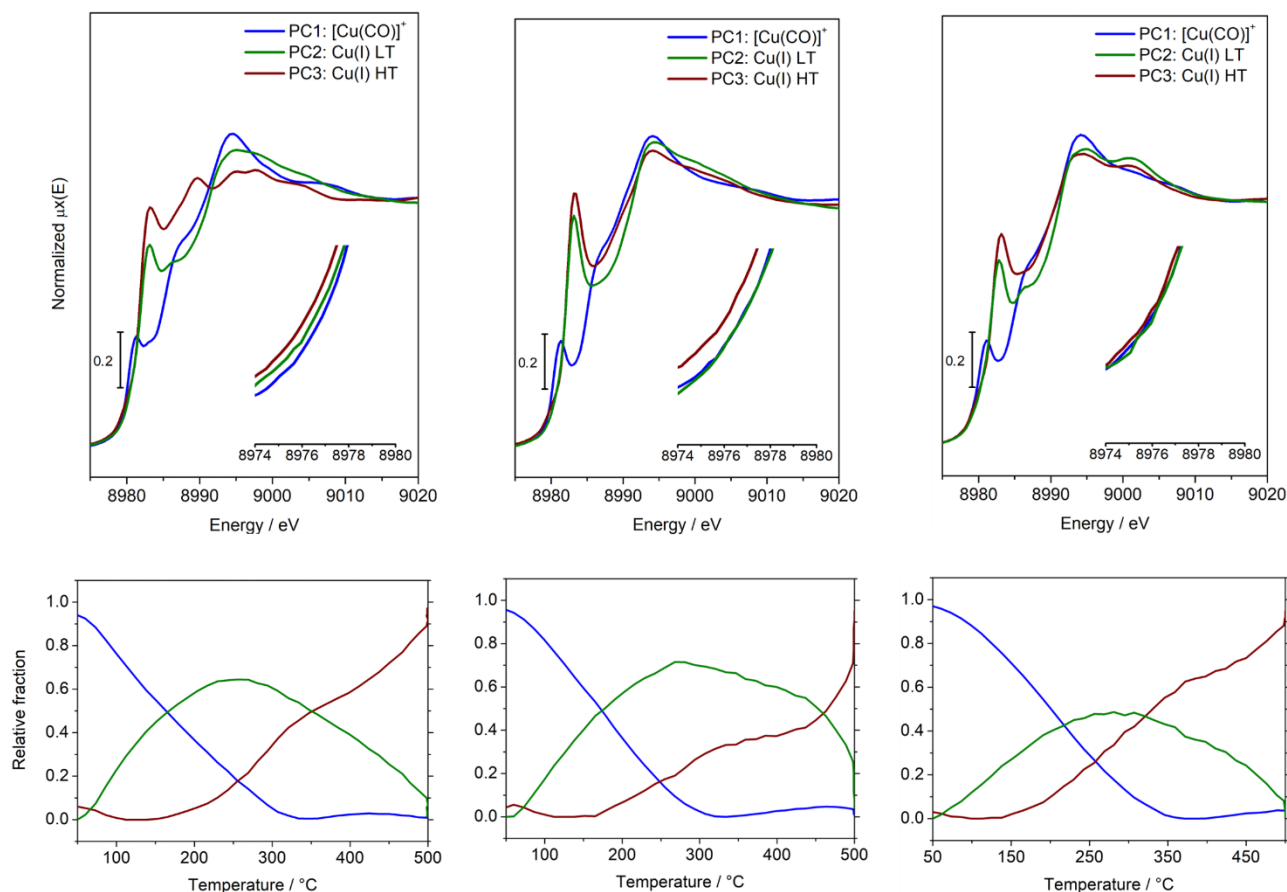


Figure S8: Full range concentration profile extracted by MCR-ALS on (0.35)Cu-CHA(5) during the steps at 50°C.

## 7. TPD after CO adsorption: MCR-ALS

MCR-ALS analysis was performed on the TPD described in the main text (endpoints in **Figure 4**) on the samples not included in the discussion in Section 3.2. The algorithm was applied using the same constraints that were previously described.



*Figure S9: Pure spectral (top) and concentration (bottom) profiles extracted by MCR-ALS on (0.48)Cu-CHA(15), (0.21)Cu-MOR(6.5) and (0.48)Cu-MFI(25) (from left to right) during the CO TPD from 50°C to 500°C in He. Insets: zoom on the 1s-3d transition zone of the edge.*



## 8. CO adsorption isotherms

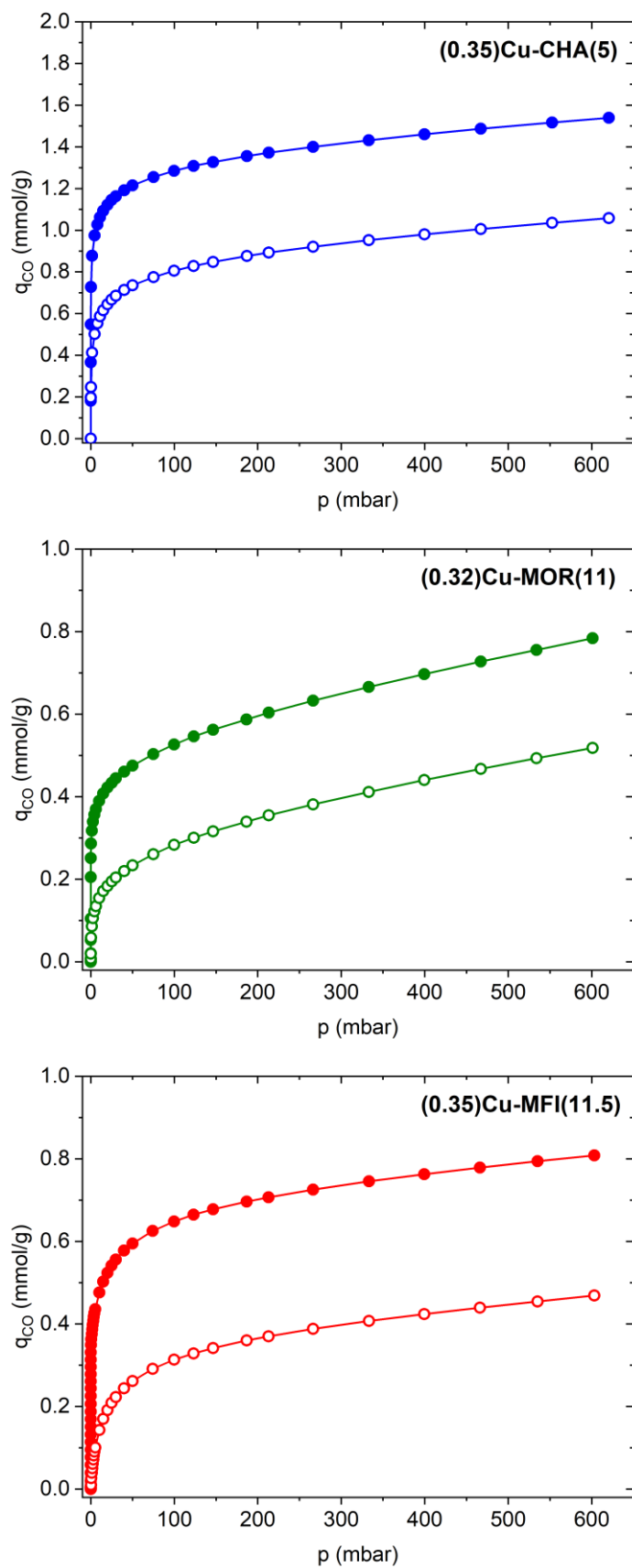


Figure S10: Primary (full dots) and secondary (empty dots) CO adsorption isotherms collected at 50 °C on (0.35)Cu-CHA(5), (0.32)Cu-MOR(11) and (0.35)Cu-MFI(11.5) samples.

## 9. DFT structures

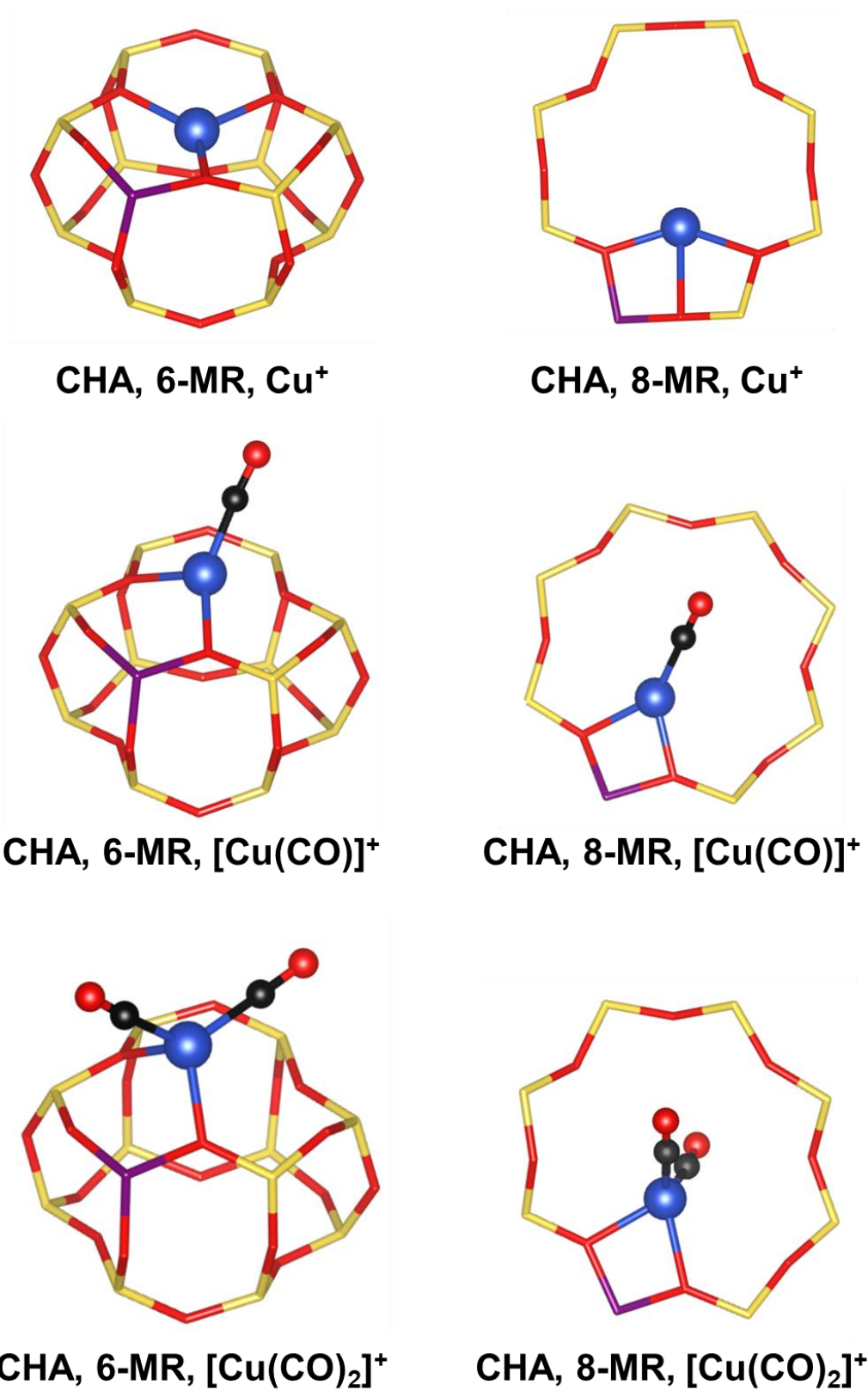
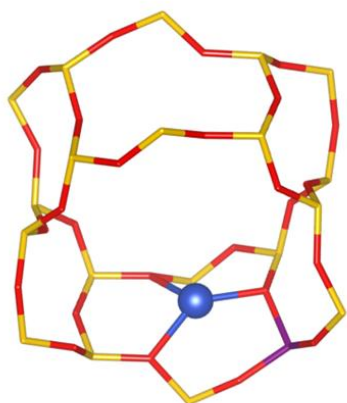
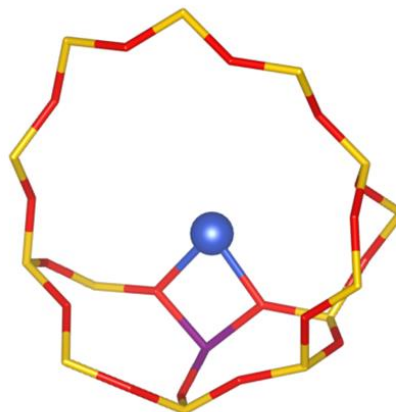


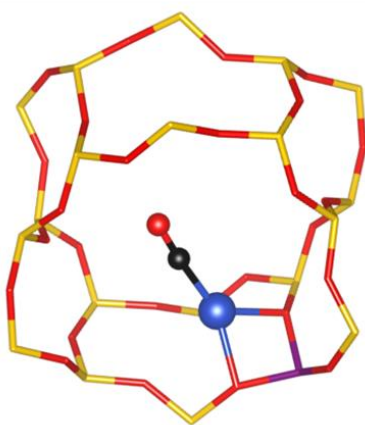
Figure S11: Representation of the local structure of Cu-CHA models ( $\text{Cu}^+$ ,  $[\text{Cu}(\text{CO})]^+$ ,  $[\text{Cu}(\text{CO})_2]^+$ ) considered in this work. Atoms colour code: black, C; red, O; purple, Al, yellow, Si; blue, Cu.



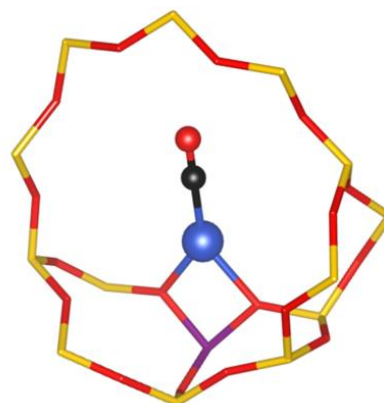
**MFI, 6-MR, Cu<sup>+</sup>**



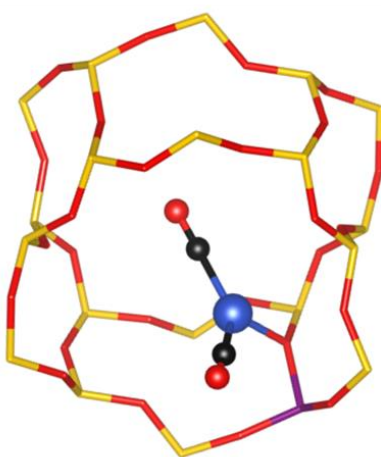
**MFI, 10-MR, Cu<sup>+</sup>**



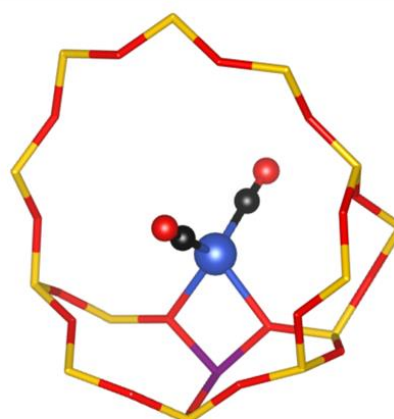
**MFI, 6-MR, [Cu(CO)]<sup>+</sup>**



**MFI, 10-MR, [Cu(CO)]<sup>+</sup>**



**MFI, 6-MR, [Cu(CO)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>**



**MFI, 10-MR, [Cu(CO)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>**

*Figure S12: Representation of the local structure of Cu-MFI models (Cu<sup>+</sup>, [Cu(CO)]<sup>+</sup>, [Cu(CO)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>) considered in this work. Atoms colour code: black, C; red, O; purple, Al; yellow, Si; blue, Cu.*

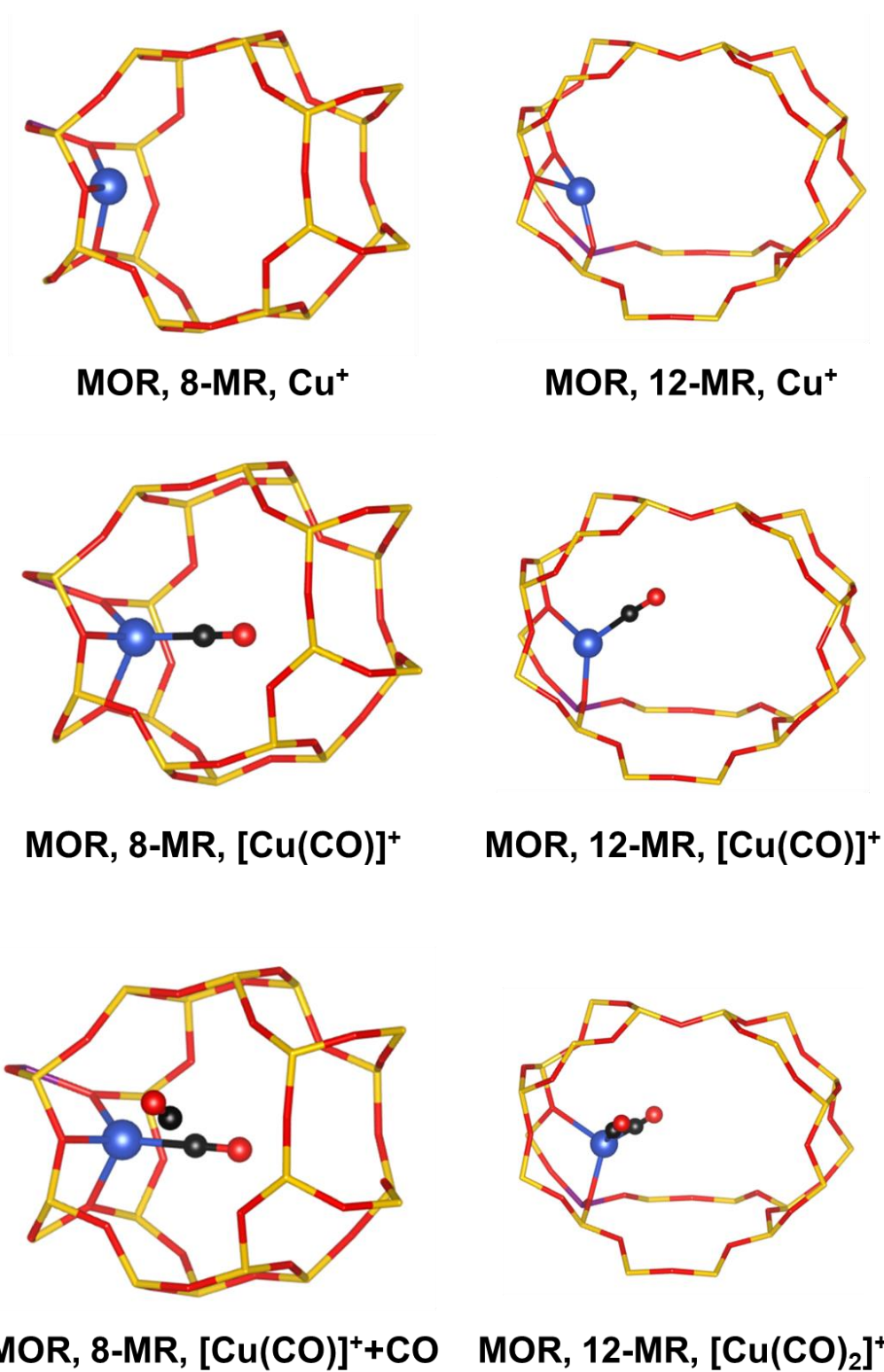


Figure S13: Representation of the local structure of Cu-MOR models (Cu<sup>+</sup>, [Cu(CO)]<sup>+</sup>, [Cu(CO)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>) considered in this work. Atoms colour code: black, C; red, O; purple, Al, yellow, Si; blue, Cu.

## Appendix A: DFT structures in .cif format

- **cha-6mr-2co.cif**

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C2 O26 Al1 Si11 Cu1'
_cell_length_a             9.295039
_cell_length_b             9.275044
_cell_length_c             9.211628
_cell_angle_alpha         95.292686
_cell_angle_beta          92.188370
_cell_angle_gamma         95.034187
_cell_volume               786.857848
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.225669  0.353578  0.229164  Uiso ? C
C2      1.0  0.396466  0.098219  0.391148  Uiso ? C
O1      1.0  0.233624  0.827919  0.248868  Uiso ? O
O2      1.0  0.248812  0.251102  0.889329  Uiso ? O
O3      1.0  0.899241  0.249530  0.253819  Uiso ? O
O4      1.0  0.081853  0.723954  0.735493  Uiso ? O
O5      1.0  0.737017  0.722323  0.084045  Uiso ? O
O6      1.0  0.741543  0.138222  0.746555  Uiso ? O
O7      1.0  0.509805  0.866958  0.146836  Uiso ? O
O8      1.0  0.116485  0.484132  0.852435  Uiso ? O
O9      1.0  0.850627  0.108986  0.487362  Uiso ? O
O10     1.0  0.484918  0.117012  0.856992  Uiso ? O
O11     1.0  0.861370  0.486549  0.130786  Uiso ? O
O12     1.0  0.125745  0.863101  0.504845  Uiso ? O
O13     1.0  0.289315  0.028544  0.044711  Uiso ? O
```

O14	1.0	0.991769	0.270000	0.992302	Uiso ? O
O15	1.0	0.047674	0.023725	0.299588	Uiso ? O
O16	1.0	0.002711	0.700118	0.002402	Uiso ? O
O17	1.0	0.690721	0.956156	0.948135	Uiso ? O
O18	1.0	0.946553	0.958466	0.700900	Uiso ? O
O19	1.0	0.281791	0.724218	0.951368	Uiso ? O
O20	1.0	0.014766	0.240189	0.705780	Uiso ? O
O21	1.0	0.767538	0.983717	0.228626	Uiso ? O
O22	1.0	0.709098	0.241375	0.022935	Uiso ? O
O23	1.0	0.954690	0.737862	0.282841	Uiso ? O
O24	1.0	0.233011	0.985298	0.755843	Uiso ? O
O25	1.0	0.211111	0.472070	0.224201	Uiso ? O
O26	1.0	0.474615	0.071180	0.478048	Uiso ? O
Al1	1.0	0.330388	0.852660	0.096019	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.093342	0.312812	0.859114	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.889856	0.091528	0.317780	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.125517	0.658569	0.887593	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.672230	0.880092	0.101250	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.886807	0.110112	0.660598	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.655783	0.111380	0.893698	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.889395	0.660546	0.124326	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.096751	0.882260	0.676207	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.863021	0.313501	0.098584	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.314188	0.093490	0.888019	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.091742	0.856866	0.331718	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.260144	0.154017	0.239800	Uiso ? Cu

• **cha-6mr-co.cif**

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C1 O25 Al1 Si11 Cu1'
_cell_length_a             9.354157
_cell_length_b             9.228398
_cell_length_c             9.274990
_cell_angle_alpha          93.261238
_cell_angle_beta           92.980164
_cell_angle_gamma          93.097267
_cell_volume               796.970454
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

```

loop\_

\_atom\_site\_label

\_atom\_site\_occupancy

\_atom\_site\_fract\_x

\_atom\_site\_fract\_y

\_atom\_site\_fract\_z

\_atom\_site\_adp\_type

\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv

\_atom\_site\_type\_symbol

C1	1.0	0.234564	0.337118	0.269037	Uiso ? C
O1	1.0	0.244671	0.845983	0.258828	Uiso ? O
O2	1.0	0.246986	0.245409	0.866001	Uiso ? O
O3	1.0	0.874589	0.241267	0.246987	Uiso ? O
O4	1.0	0.103660	0.730031	0.740457	Uiso ? O
O5	1.0	0.745090	0.728912	0.102559	Uiso ? O
O6	1.0	0.736444	0.119782	0.739220	Uiso ? O
O7	1.0	0.510419	0.872571	0.131819	Uiso ? O
O8	1.0	0.112721	0.487553	0.870640	Uiso ? O
O9	1.0	0.870288	0.116055	0.495161	Uiso ? O
O10	1.0	0.493178	0.117490	0.871982	Uiso ? O
O11	1.0	0.881820	0.488936	0.125671	Uiso ? O
O12	1.0	0.116218	0.869880	0.504429	Uiso ? O
O13	1.0	0.274398	0.021665	0.026919	Uiso ? O
O14	1.0	0.010743	0.262586	0.008981	Uiso ? O
O15	1.0	0.032028	0.017332	0.283141	Uiso ? O
O16	1.0	0.999903	0.713924	0.997497	Uiso ? O
O17	1.0	0.719633	0.979609	0.978774	Uiso ? O
O18	1.0	0.975229	0.977334	0.720669	Uiso ? O
O19	1.0	0.280828	0.713827	0.973836	Uiso ? O
O20	1.0	0.991128	0.262445	0.721770	Uiso ? O
O21	1.0	0.748967	0.975814	0.264329	Uiso ? O
O22	1.0	0.724237	0.266001	0.994294	Uiso ? O
O23	1.0	0.976992	0.727955	0.281015	Uiso ? O
O24	1.0	0.261388	0.981704	0.738824	Uiso ? O
O25	1.0	0.254031	0.451805	0.316909	Uiso ? O
Al1	1.0	0.330592	0.854414	0.099671	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.091769	0.315388	0.864622	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.878513	0.087598	0.323380	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.129055	0.662263	0.897385	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.676827	0.887115	0.118094	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.891536	0.116787	0.668890	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.665844	0.118653	0.895971	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.900983	0.664433	0.126018	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.115004	0.888920	0.677168	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.869214	0.316148	0.092697	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.320912	0.089895	0.876051	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.096567	0.858708	0.331290	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.190214	0.153540	0.177506	Uiso ? Cu

• **cha-6mr.cif**

#=====

# CRYSTAL DATA

#-----

data\_VESTA\_phase\_1

\_chemical\_name\_common 'O24 Al1 Si11 Cu1'

\_cell\_length\_a 9.377836

\_cell\_length\_b 9.238944

\_cell\_length\_c 9.289445

\_cell\_angle\_alpha 92.037285

\_cell\_angle\_beta 93.577606

\_cell\_angle\_gamma 92.668343

\_cell\_volume 801.813043

\_space\_group\_name\_H-M\_alt 'P 1'

\_space\_group\_IT\_number 1

loop\_

\_space\_group\_symop\_operation\_xyz

'x, y, z'

loop\_

\_atom\_site\_label

\_atom\_site\_occupancy

\_atom\_site\_fract\_x

\_atom\_site\_fract\_y

\_atom\_site\_fract\_z

\_atom\_site\_adp\_type

\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv

\_atom\_site\_type\_symbol

O1 1.0 0.251007 0.868513 0.266958 Uiso ? O

O2 1.0 0.251060 0.254774 0.872400 Uiso ? O

O3 1.0 0.868904 0.246192 0.246927 Uiso ? O

O4 1.0 0.133214 0.749426 0.755129 Uiso ? O

O5 1.0 0.753779 0.743580 0.114801 Uiso ? O

O6 1.0 0.742983 0.122261 0.744790 Uiso ? O

O7 1.0 0.514042 0.878218 0.129762 Uiso ? O

O8 1.0 0.110082 0.497210 0.868844 Uiso ? O

O9 1.0 0.875882 0.126787 0.501930 Uiso ? O

O10 1.0 0.499800 0.127750 0.874380 Uiso ? O

O11 1.0 0.885159 0.498452 0.126900 Uiso ? O

O12 1.0 0.112173 0.871567 0.508212 Uiso ? O

O13 1.0 0.275397 0.010621 0.006866 Uiso ? O

O14 1.0 0.015418 0.272828 0.015620 Uiso ? O

O15 1.0 0.022171 0.019275 0.285515 Uiso ? O

O16 1.0 0.997690 0.722996 0.992884 Uiso ? O

O17 1.0 0.729401 0.998126 0.995319 Uiso ? O

O18 1.0 0.986095 0.985878 0.727898 Uiso ? O

O19 1.0 0.279514 0.702865 0.004581 Uiso ? O



O20	1.0	0.993051	0.269986	0.729404	Uiso ? O
O21	1.0	0.741479	0.984548	0.279888	Uiso ? O
O22	1.0	0.730558	0.281560	0.988383	Uiso ? O
O23	1.0	0.993585	0.729300	0.279302	Uiso ? O
O24	1.0	0.270719	0.007045	0.721698	Uiso ? O
Al1	1.0	0.334362	0.857841	0.106444	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.096085	0.325481	0.868757	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.873681	0.095086	0.330890	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.135318	0.669135	0.907866	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.680417	0.898766	0.129145	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.897621	0.124168	0.675574	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.672236	0.130578	0.900373	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.907892	0.673517	0.128031	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.127172	0.902786	0.679427	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.870828	0.327081	0.094929	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.327724	0.098958	0.869244	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.100990	0.866391	0.335375	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.101256	0.080663	0.094293	Uiso ? Cu

• **cha-8mr-2co.cif**

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C2 O26 Al1 Si11 Cu1'
_cell_length_a             9.347719
_cell_length_b             9.168681
_cell_length_c             9.327014
_cell_angle_alpha         94.144547
_cell_angle_beta          95.697090
_cell_angle_gamma         94.949127
_cell_volume               789.830347
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
```

C1	1.0	0.504994	0.149204	0.439828	Uiso ? C
C2	1.0	0.484463	0.813423	0.555375	Uiso ? C
O1	1.0	0.256140	0.897258	0.271167	Uiso ? O
O2	1.0	0.254756	0.257219	0.886575	Uiso ? O
O3	1.0	0.892391	0.254995	0.262344	Uiso ? O
O4	1.0	0.130995	0.744015	0.757857	Uiso ? O
O5	1.0	0.731607	0.723903	0.101277	Uiso ? O
O6	1.0	0.738363	0.083726	0.747826	Uiso ? O
O7	1.0	0.507033	0.858267	0.183002	Uiso ? O
O8	1.0	0.100143	0.484282	0.850836	Uiso ? O
O9	1.0	0.831097	0.128197	0.499067	Uiso ? O
O10	1.0	0.494458	0.142836	0.838935	Uiso ? O
O11	1.0	0.873539	0.491721	0.126927	Uiso ? O
O12	1.0	0.138437	0.823170	0.500287	Uiso ? O
O13	1.0	0.309031	0.006601	0.999439	Uiso ? O
O14	1.0	0.021586	0.277508	0.023499	Uiso ? O
O15	1.0	0.038289	0.034372	0.350578	Uiso ? O
O16	1.0	0.965456	0.700779	0.964309	Uiso ? O
O17	1.0	0.653110	0.953804	0.970290	Uiso ? O
O18	1.0	0.959047	0.943525	0.669631	Uiso ? O
O19	1.0	0.251407	0.698506	0.020118	Uiso ? O
O20	1.0	0.994918	0.230165	0.737259	Uiso ? O
O21	1.0	0.764967	0.986434	0.245009	Uiso ? O
O22	1.0	0.736387	0.240945	0.003545	Uiso ? O
O23	1.0	0.990425	0.750884	0.248932	Uiso ? O
O24	1.0	0.246110	0.012933	0.715146	Uiso ? O
O25	1.0	0.523445	0.270758	0.469065	Uiso ? O
O26	1.0	0.492484	0.748235	0.652815	Uiso ? O
Al1	1.0	0.327786	0.862667	0.106072	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.095167	0.313190	0.876409	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.883484	0.102003	0.338847	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.115973	0.657617	0.901579	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.663168	0.879462	0.123763	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.882475	0.096136	0.664976	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.656520	0.106697	0.892312	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.891320	0.666310	0.109784	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.117875	0.882556	0.663967	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.880779	0.316918	0.102944	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.326021	0.101935	0.865066	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.104850	0.875245	0.338950	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.462356	0.938515	0.399444	Uiso ? Cu

• **cha-8mr-co.cif**

#=====

# CRYSTAL DATA

#-----

data\_VESTA\_phase\_1

\_chemical\_name\_common 'C1 O25 Al1 Si11 Cu1'

```

_cell_length_a      9.323012
_cell_length_b      9.161018
_cell_length_c      9.399199
_cell_angle_alpha    93.243538
_cell_angle_beta    94.245796
_cell_angle_gamma    93.645287
_cell_volume        797.430403
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number  1

```

```

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

```

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_adp_type
  _atom_site_U_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.497387  0.138551  0.491754  Uiso ? C
O1      1.0  0.254329  0.885392  0.267122  Uiso ? O
O2      1.0  0.255180  0.255767  0.885399  Uiso ? O
O3      1.0  0.887571  0.250290  0.259233  Uiso ? O
O4      1.0  0.137247  0.747715  0.764178  Uiso ? O
O5      1.0  0.741191  0.730729  0.117414  Uiso ? O
O6      1.0  0.749452  0.100175  0.759029  Uiso ? O
O7      1.0  0.506895  0.867194  0.180474  Uiso ? O
O8      1.0  0.098952  0.487971  0.859724  Uiso ? O
O9      1.0  0.839062  0.136302  0.505929  Uiso ? O
O10     1.0  0.498438  0.137719  0.852040  Uiso ? O
O11     1.0  0.881351  0.492988  0.129794  Uiso ? O
O12     1.0  0.146302  0.829287  0.506803  Uiso ? O
O13     1.0  0.299933  0.000172  0.998211  Uiso ? O
O14     1.0  0.014907  0.269204  0.017058  Uiso ? O
O15     1.0  0.034731  0.027674  0.344559  Uiso ? O
O16     1.0  0.981492  0.713668  0.983472  Uiso ? O
O17     1.0  0.678695  0.966429  0.985929  Uiso ? O
O18     1.0  0.970767  0.955206  0.679363  Uiso ? O
O19     1.0  0.265493  0.690265  0.016162  Uiso ? O
O20     1.0  0.002816  0.242408  0.732552  Uiso ? O
O21     1.0  0.756146  0.987299  0.266621  Uiso ? O
O22     1.0  0.730531  0.255529  0.008775  Uiso ? O
O23     1.0  0.994480  0.740058  0.266419  Uiso ? O
O24     1.0  0.257924  0.013138  0.717091  Uiso ? O
O25     1.0  0.521109  0.243893  0.558976  Uiso ? O
Al1     1.0  0.328390  0.854349  0.101471  Uiso ? Al

```

Si1	1.0	0.095268	0.314700	0.875379	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.881196	0.101332	0.343634	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.124556	0.660084	0.907832	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.670872	0.887165	0.135559	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.891644	0.107867	0.670525	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.664408	0.116282	0.902721	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.900654	0.668694	0.123378	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.128124	0.887796	0.669892	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.878404	0.317664	0.102910	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.327643	0.098961	0.867514	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.105300	0.869040	0.344044	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.443818	0.981859	0.363503	Uiso ? Cu

• **cha-8mr.cif**

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'O24 Al1 Si11 Cu1'
_cell_length_a             9.026483
_cell_length_b             9.340766
_cell_length_c             9.370975
_cell_angle_alpha         93.807991
_cell_angle_beta          94.920898
_cell_angle_gamma         94.501801
_cell_volume               782.634974
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_adp_type
  _atom_site_U_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
  O1      1.0  0.279981  0.910857  0.277696  Uiso ? O
  O2      1.0  0.268321  0.262146  0.884731  Uiso ? O
  O3      1.0  0.882264  0.240940  0.245006  Uiso ? O
  O4      1.0  0.120865  0.755193  0.758357  Uiso ? O
  O5      1.0  0.755034  0.749803  0.131578  Uiso ? O
  O6      1.0  0.728782  0.100243  0.742173  Uiso ? O

```

O7	1.0	0.505279	0.876472	0.109990	Uiso ? O
O8	1.0	0.127502	0.492473	0.829253	Uiso ? O
O9	1.0	0.849404	0.154973	0.504052	Uiso ? O
O10	1.0	0.498602	0.109234	0.891183	Uiso ? O
O11	1.0	0.862395	0.498921	0.160222	Uiso ? O
O12	1.0	0.143474	0.837784	0.502580	Uiso ? O
O13	1.0	0.248992	0.007813	0.998057	Uiso ? O
O14	1.0	0.039623	0.324921	0.032742	Uiso ? O
O15	1.0	0.018622	0.016172	0.326411	Uiso ? O
O16	1.0	0.953205	0.665984	0.960279	Uiso ? O
O17	1.0	0.744830	0.994160	0.998071	Uiso ? O
O18	1.0	0.959563	0.960802	0.668705	Uiso ? O
O19	1.0	0.244481	0.704015	0.018003	Uiso ? O
O20	1.0	0.995700	0.238757	0.754970	Uiso ? O
O21	1.0	0.719696	0.996927	0.282127	Uiso ? O
O22	1.0	0.744933	0.273914	0.986338	Uiso ? O
O23	1.0	0.030780	0.741306	0.241034	Uiso ? O
O24	1.0	0.256543	0.016695	0.718473	Uiso ? O
Al1	1.0	0.313767	0.870013	0.093797	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.108782	0.330373	0.877364	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.872411	0.103948	0.339958	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.115048	0.656386	0.893457	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.680743	0.899803	0.122648	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.885410	0.113404	0.668795	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.677102	0.120498	0.903850	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.903017	0.663644	0.122210	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.121045	0.893468	0.666239	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.882800	0.334119	0.104884	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.317521	0.097907	0.876360	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.117569	0.877297	0.338250	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.495959	0.977038	0.347119	Uiso ? Cu

• **mfi-10mr-2co.cif**

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C2 O194 Al1 Si95 Cu1'
_cell_length_a             19.564142
_cell_length_b             19.880215
_cell_length_c             13.282964
_cell_angle_alpha         89.722397
_cell_angle_beta          91.500175
_cell_angle_gamma         89.874397
_cell_volume               5164.421978
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

```

loop\_  
\_space\_group\_symop\_operation\_xyz  
'x, y, z'

loop\_  
\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_occupancy  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z  
\_atom\_site\_adp\_type  
\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv  
\_atom\_site\_type\_symbol

C1	1.0	0.454495	0.569455	0.776531	Uiso	? C
C2	1.0	0.425581	0.398270	0.751061	Uiso	? C
O1	1.0	0.751560	0.753226	0.244219	Uiso	? O
O2	1.0	0.746246	0.696769	0.419968	Uiso	? O
O3	1.0	0.705403	0.586014	0.511613	Uiso	? O
O4	1.0	0.744794	0.490210	0.380723	Uiso	? O
O5	1.0	0.722137	0.504222	0.181763	Uiso	? O
O6	1.0	0.716437	0.624672	0.256757	Uiso	? O
O7	1.0	0.520055	0.741472	0.196476	Uiso	? O
O8	1.0	0.503647	0.698773	0.379684	Uiso	? O
O9	1.0	0.521942	0.581817	0.470228	Uiso	? O
O10	1.0	0.510364	0.446009	0.403588	Uiso	? O
O11	1.0	0.507314	0.492973	0.212152	Uiso	? O
O12	1.0	0.556413	0.617798	0.238518	Uiso	? O
O13	1.0	0.629657	0.717066	0.316968	Uiso	? O
O14	1.0	0.623195	0.469297	0.304179	Uiso	? O
O15	1.0	0.790941	0.813429	0.076024	Uiso	? O
O16	1.0	0.665632	0.759306	0.093245	Uiso	? O
O17	1.0	0.543818	0.802149	0.026148	Uiso	? O
O18	1.0	0.812125	0.595793	0.125378	Uiso	? O
O19	1.0	0.685477	0.605364	0.060229	Uiso	? O
O20	1.0	0.555622	0.564176	0.057451	Uiso	? O
O21	1.0	0.723701	0.385015	0.258477	Uiso	? O
O22	1.0	0.541664	0.366874	0.252704	Uiso	? O
O23	1.0	0.424143	0.818898	0.108270	Uiso	? O
O24	1.0	0.438488	0.594854	0.138886	Uiso	? O
O25	1.0	0.417864	0.661002	0.518775	Uiso	? O
O26	1.0	0.417213	0.499108	0.552710	Uiso	? O
O27	1.0	0.114457	0.763489	0.204391	Uiso	? O
O28	1.0	0.136135	0.706973	0.382846	Uiso	? O
O29	1.0	0.097818	0.587658	0.452812	Uiso	? O
O30	1.0	0.122400	0.460725	0.406600	Uiso	? O
O31	1.0	0.103894	0.500288	0.214180	Uiso	? O
O32	1.0	0.115595	0.631882	0.223036	Uiso	? O
O33	1.0	0.350635	0.759921	0.248955	Uiso	? O
O34	1.0	0.305551	0.702383	0.417585	Uiso	? O
O35	1.0	0.311531	0.578649	0.494523	Uiso	? O

036	1.0	0.346321	0.470766	0.389647	Uiso ? 0
037	1.0	0.343940	0.504478	0.194964	Uiso ? 0
038	1.0	0.344291	0.626494	0.270430	Uiso ? 0
039	1.0	0.231373	0.700404	0.244801	Uiso ? 0
040	1.0	0.228392	0.484060	0.291734	Uiso ? 0
041	1.0	0.045706	0.829554	0.057891	Uiso ? 0
042	1.0	0.178308	0.808789	0.041056	Uiso ? 0
043	1.0	0.306517	0.766518	0.057998	Uiso ? 0
044	1.0	0.054607	0.575309	0.064810	Uiso ? 0
045	1.0	0.188452	0.561804	0.092757	Uiso ? 0
046	1.0	0.314065	0.609526	0.075540	Uiso ? 0
047	1.0	0.147981	0.377964	0.261040	Uiso ? 0
048	1.0	0.311355	0.381443	0.250517	Uiso ? 0
049	1.0	0.599703	0.004254	0.695372	Uiso ? 0
050	1.0	0.599754	0.062923	0.520196	Uiso ? 0
051	1.0	0.638889	0.176394	0.429677	Uiso ? 0
052	1.0	0.598811	0.273401	0.553672	Uiso ? 0
053	1.0	0.637764	0.257461	0.748631	Uiso ? 0
054	1.0	0.624576	0.135362	0.681146	Uiso ? 0
055	1.0	0.828608	0.025634	0.736960	Uiso ? 0
056	1.0	0.841768	0.078575	0.557557	Uiso ? 0
057	1.0	0.822331	0.189609	0.448926	Uiso ? 0
058	1.0	0.854544	0.294001	0.566551	Uiso ? 0
059	1.0	0.818840	0.272954	0.756608	Uiso ? 0
060	1.0	0.787416	0.149349	0.705694	Uiso ? 0
061	1.0	0.717833	0.049138	0.620828	Uiso ? 0
062	1.0	0.725123	0.297419	0.610445	Uiso ? 0
063	1.0	0.551290	0.952534	0.863561	Uiso ? 0
064	1.0	0.681193	0.993481	0.852376	Uiso ? 0
065	1.0	0.807333	0.966930	0.911372	Uiso ? 0
066	1.0	0.539729	0.179383	0.818483	Uiso ? 0
067	1.0	0.666683	0.154523	0.871353	Uiso ? 0
068	1.0	0.798009	0.182646	0.900024	Uiso ? 0
069	1.0	0.624167	0.376492	0.676598	Uiso ? 0
070	1.0	0.804828	0.393293	0.683000	Uiso ? 0
071	1.0	0.923658	0.948124	0.822515	Uiso ? 0
072	1.0	0.908564	0.174941	0.795333	Uiso ? 0
073	1.0	0.929156	0.110715	0.418523	Uiso ? 0
074	1.0	0.926254	0.270652	0.404340	Uiso ? 0
075	1.0	0.231447	0.011708	0.737591	Uiso ? 0
076	1.0	0.216955	0.068651	0.558346	Uiso ? 0
077	1.0	0.248905	0.189441	0.488731	Uiso ? 0
078	1.0	0.210156	0.312578	0.537417	Uiso ? 0
079	1.0	0.246048	0.274656	0.726824	Uiso ? 0
080	1.0	0.235885	0.142844	0.720039	Uiso ? 0
081	1.0	0.999687	0.015314	0.692361	Uiso ? 0
082	1.0	0.041325	0.069320	0.520526	Uiso ? 0
083	1.0	0.034415	0.194139	0.449032	Uiso ? 0
084	1.0	0.014330	0.310501	0.544280	Uiso ? 0
085	1.0	0.991280	0.271987	0.733626	Uiso ? 0

086	1.0	0.002383	0.148440	0.662519	Uiso ? 0
087	1.0	0.117813	0.078713	0.690786	Uiso ? 0
088	1.0	0.116846	0.291808	0.674703	Uiso ? 0
089	1.0	0.299522	0.950231	0.888050	Uiso ? 0
090	1.0	0.165507	0.963446	0.897861	Uiso ? 0
091	1.0	0.037073	0.004697	0.885341	Uiso ? 0
092	1.0	0.302926	0.202461	0.871909	Uiso ? 0
093	1.0	0.167267	0.211628	0.855760	Uiso ? 0
094	1.0	0.037091	0.170567	0.852139	Uiso ? 0
095	1.0	0.200329	0.397272	0.685738	Uiso ? 0
096	1.0	0.032977	0.396402	0.691171	Uiso ? 0
097	1.0	0.104672	0.262463	0.191747	Uiso ? 0
098	1.0	0.097091	0.200364	0.022058	Uiso ? 0
099	1.0	0.137337	0.091471	0.925476	Uiso ? 0
0100	1.0	0.101274	0.999290	0.061838	Uiso ? 0
0101	1.0	0.140146	0.009560	0.257035	Uiso ? 0
0102	1.0	0.128767	0.131231	0.187443	Uiso ? 0
0103	1.0	0.325510	0.250414	0.223432	Uiso ? 0
0104	1.0	0.345206	0.179437	0.060871	Uiso ? 0
0105	1.0	0.320417	0.077138	0.936046	Uiso ? 0
0106	1.0	0.357246	0.981059	0.066516	Uiso ? 0
0107	1.0	0.324643	0.995608	0.257687	Uiso ? 0
0108	1.0	0.288244	0.122366	0.219242	Uiso ? 0
0109	1.0	0.219192	0.212791	0.110146	Uiso ? 0
0110	1.0	0.228706	0.976787	0.115676	Uiso ? 0
0111	1.0	0.051104	0.310992	0.356497	Uiso ? 0
0112	1.0	0.180324	0.264342	0.356170	Uiso ? 0
0113	1.0	0.307717	0.297073	0.407035	Uiso ? 0
0114	1.0	0.042319	0.090470	0.324070	Uiso ? 0
0115	1.0	0.169277	0.110780	0.379913	Uiso ? 0
0116	1.0	0.300489	0.078738	0.407404	Uiso ? 0
0117	1.0	0.132976	0.892166	0.177594	Uiso ? 0
0118	1.0	0.310965	0.876559	0.172786	Uiso ? 0
0119	1.0	0.423479	0.318977	0.316299	Uiso ? 0
0120	1.0	0.410740	0.095690	0.300997	Uiso ? 0
0121	1.0	0.427189	0.156681	0.912171	Uiso ? 0
0122	1.0	0.426495	0.995871	0.901313	Uiso ? 0
0123	1.0	0.731473	0.256017	0.227765	Uiso ? 0
0124	1.0	0.713855	0.197396	0.049364	Uiso ? 0
0125	1.0	0.742919	0.074596	0.984228	Uiso ? 0
0126	1.0	0.707382	0.952345	0.039287	Uiso ? 0
0127	1.0	0.747158	0.993933	0.225473	Uiso ? 0
0128	1.0	0.734495	0.125165	0.213066	Uiso ? 0
0129	1.0	0.496203	0.250517	0.185969	Uiso ? 0
0130	1.0	0.538934	0.196965	0.015527	Uiso ? 0
0131	1.0	0.533877	0.073609	0.941139	Uiso ? 0
0132	1.0	0.512369	0.963197	0.050260	Uiso ? 0
0133	1.0	0.492103	0.996989	0.241288	Uiso ? 0
0134	1.0	0.503092	0.117854	0.161753	Uiso ? 0
0135	1.0	0.616620	0.190768	0.185110	Uiso ? 0



0136	1.0	0.617282	0.978199	0.178254	Uiso ? 0
0137	1.0	0.799115	0.312794	0.382839	Uiso ? 0
0138	1.0	0.664558	0.303495	0.386897	Uiso ? 0
0139	1.0	0.536930	0.259794	0.377288	Uiso ? 0
0140	1.0	0.806486	0.069606	0.363838	Uiso ? 0
0141	1.0	0.671039	0.058042	0.356264	Uiso ? 0
0142	1.0	0.540285	0.099743	0.351965	Uiso ? 0
0143	1.0	0.699552	0.870929	0.192094	Uiso ? 0
0144	1.0	0.532753	0.874255	0.194679	Uiso ? 0
0145	1.0	0.247018	0.515898	0.737334	Uiso ? 0
0146	1.0	0.246734	0.569481	0.915081	Uiso ? 0
0147	1.0	0.207004	0.680814	0.007741	Uiso ? 0
0148	1.0	0.246790	0.775885	0.879441	Uiso ? 0
0149	1.0	0.210663	0.766263	0.682446	Uiso ? 0
0150	1.0	0.219709	0.645464	0.755184	Uiso ? 0
0151	1.0	0.009603	0.524077	0.730502	Uiso ? 0
0152	1.0	0.008145	0.604922	0.882226	Uiso ? 0
0153	1.0	0.028901	0.702955	0.012850	Uiso ? 0
0154	1.0	0.992324	0.796593	0.877239	Uiso ? 0
0155	1.0	0.019582	0.776783	0.686014	Uiso ? 0
0156	1.0	0.058303	0.648747	0.711235	Uiso ? 0
0157	1.0	0.127994	0.557894	0.817105	Uiso ? 0
0158	1.0	0.120092	0.796184	0.821205	Uiso ? 0
0159	1.0	0.288258	0.458348	0.568800	Uiso ? 0
0160	1.0	0.160485	0.507608	0.585993	Uiso ? 0
0161	1.0	0.030457	0.488077	0.541593	Uiso ? 0
0162	1.0	0.306660	0.683646	0.615782	Uiso ? 0
0163	1.0	0.179539	0.663155	0.562501	Uiso ? 0
0164	1.0	0.050606	0.702018	0.529985	Uiso ? 0
0165	1.0	0.217362	0.882819	0.764495	Uiso ? 0
0166	1.0	0.040171	0.897311	0.763848	Uiso ? 0
0167	1.0	0.917443	0.453690	0.629159	Uiso ? 0
0168	1.0	0.937137	0.677574	0.624804	Uiso ? 0
0169	1.0	0.927943	0.617684	0.038636	Uiso ? 0
0170	1.0	0.919339	0.782050	0.038734	Uiso ? 0
0171	1.0	0.656417	0.499035	0.728351	Uiso ? 0
0172	1.0	0.622496	0.565496	0.890366	Uiso ? 0
0173	1.0	0.591370	0.682007	0.972668	Uiso ? 0
0174	1.0	0.647680	0.796836	0.905930	Uiso ? 0
0175	1.0	0.600368	0.755736	0.727461	Uiso ? 0
0176	1.0	0.605692	0.622680	0.710705	Uiso ? 0
0177	1.0	0.831747	0.513895	0.753747	Uiso ? 0
0178	1.0	0.822475	0.570903	0.929733	Uiso ? 0
0179	1.0	0.819541	0.695935	0.993648	Uiso ? 0
0180	1.0	0.832182	0.807838	0.888144	Uiso ? 0
0181	1.0	0.854856	0.769108	0.698197	Uiso ? 0
0182	1.0	0.857299	0.645585	0.774732	Uiso ? 0
0183	1.0	0.730992	0.602974	0.784833	Uiso ? 0
0184	1.0	0.730353	0.786758	0.755231	Uiso ? 0
0185	1.0	0.544433	0.476205	0.613985	Uiso ? 0

O186	1.0	0.668688	0.460250	0.537746	Uiso ? O
O187	1.0	0.800178	0.498266	0.559884	Uiso ? O
O188	1.0	0.539685	0.696435	0.573955	Uiso ? O
O189	1.0	0.675436	0.702972	0.586911	Uiso ? O
O190	1.0	0.805531	0.662767	0.591324	Uiso ? O
O191	1.0	0.637461	0.883431	0.755082	Uiso ? O
O192	1.0	0.812362	0.893349	0.741772	Uiso ? O
O193	1.0	0.453000	0.617947	0.819269	Uiso ? O
O194	1.0	0.408151	0.347361	0.776570	Uiso ? O
Al1	1.0	0.500582	0.500642	0.501354	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.727520	0.800050	0.149635	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.710244	0.697803	0.309000	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.733687	0.662130	0.528323	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.729254	0.508475	0.496463	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.703172	0.461982	0.281891	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.733425	0.582916	0.156242	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.504864	0.809077	0.132491	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.552722	0.693675	0.283921	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.496871	0.657416	0.485316	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.544691	0.443758	0.296013	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.515206	0.566971	0.163102	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.118070	0.822227	0.120213	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.149528	0.700785	0.263713	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.116070	0.665068	0.482183	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.102683	0.511413	0.496027	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.150369	0.456146	0.292969	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.115679	0.568002	0.148361	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.347829	0.805726	0.147099	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.307917	0.697934	0.295974	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.336261	0.656336	0.510330	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.341184	0.502070	0.501666	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.307561	0.460245	0.281518	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.360311	0.582826	0.170256	Uiso ? Si
Si24	1.0	0.617342	0.957773	0.793038	Uiso ? Si
Si25	1.0	0.636112	0.062586	0.630648	Uiso ? Si
Si26	1.0	0.612425	0.099463	0.413247	Uiso ? Si
Si27	1.0	0.609892	0.253058	0.436759	Uiso ? Si
Si28	1.0	0.646465	0.301177	0.646416	Uiso ? Si
Si29	1.0	0.617840	0.181496	0.779839	Uiso ? Si
Si30	1.0	0.842628	0.958300	0.802610	Uiso ? Si
Si31	1.0	0.793419	0.075276	0.654472	Uiso ? Si
Si32	1.0	0.849635	0.112167	0.446909	Uiso ? Si
Si33	1.0	0.850401	0.266754	0.450803	Uiso ? Si
Si34	1.0	0.801457	0.314562	0.653814	Uiso ? Si
Si35	1.0	0.828416	0.194882	0.789422	Uiso ? Si
Si36	1.0	0.228350	0.953303	0.822183	Uiso ? Si
Si37	1.0	0.200184	0.075470	0.676568	Uiso ? Si
Si38	1.0	0.233832	0.111562	0.458272	Uiso ? Si
Si39	1.0	0.237097	0.265563	0.447609	Uiso ? Si
Si40	1.0	0.193847	0.318697	0.656140	Uiso ? Si

Si41	1.0	0.237774	0.206870	0.794559	Uiso ? Si
Si42	1.0	0.000396	0.966457	0.790873	Uiso ? Si
Si43	1.0	0.040724	0.077131	0.641897	Uiso ? Si
Si44	1.0	0.011098	0.116434	0.428795	Uiso ? Si
Si45	1.0	0.006433	0.271118	0.438735	Uiso ? Si
Si46	1.0	0.038254	0.317666	0.660918	Uiso ? Si
Si47	1.0	0.985095	0.192575	0.761668	Uiso ? Si
Si48	1.0	0.120498	0.304578	0.293248	Uiso ? Si
Si49	1.0	0.138034	0.201820	0.129059	Uiso ? Si
Si50	1.0	0.109618	0.168417	0.912409	Uiso ? Si
Si51	1.0	0.110220	0.015127	0.942862	Uiso ? Si
Si52	1.0	0.150392	0.969694	0.152411	Uiso ? Si
Si53	1.0	0.120701	0.085850	0.287302	Uiso ? Si
Si54	1.0	0.342110	0.311935	0.298822	Uiso ? Si
Si55	1.0	0.294489	0.191479	0.153628	Uiso ? Si
Si56	1.0	0.348576	0.153998	0.945243	Uiso ? Si
Si57	1.0	0.350810	0.000937	0.947572	Uiso ? Si
Si58	1.0	0.305699	0.956824	0.153490	Uiso ? Si
Si59	1.0	0.331402	0.072762	0.295918	Uiso ? Si
Si60	1.0	0.729290	0.312966	0.314228	Uiso ? Si
Si61	1.0	0.698791	0.192561	0.168597	Uiso ? Si
Si62	1.0	0.730309	0.152586	0.951422	Uiso ? Si
Si63	1.0	0.734909	0.997311	0.947407	Uiso ? Si
Si64	1.0	0.693630	0.949167	0.159213	Uiso ? Si
Si65	1.0	0.739639	0.062468	0.290657	Uiso ? Si
Si66	1.0	0.499974	0.299738	0.283581	Uiso ? Si
Si67	1.0	0.539193	0.189735	0.137188	Uiso ? Si
Si68	1.0	0.509274	0.151233	0.922829	Uiso ? Si
Si69	1.0	0.506027	0.996495	0.939621	Uiso ? Si
Si70	1.0	0.538494	0.953359	0.165696	Uiso ? Si
Si71	1.0	0.486646	0.076859	0.264829	Uiso ? Si
Si72	1.0	0.224143	0.469366	0.642123	Uiso ? Si
Si73	1.0	0.209314	0.572117	0.805178	Uiso ? Si
Si74	1.0	0.238852	0.605550	0.023337	Uiso ? Si
Si75	1.0	0.234568	0.757807	0.996979	Uiso ? Si
Si76	1.0	0.198862	0.805285	0.787468	Uiso ? Si
Si77	1.0	0.228648	0.689418	0.653537	Uiso ? Si
Si78	1.0	0.998096	0.465559	0.647997	Uiso ? Si
Si79	1.0	0.051498	0.583854	0.785413	Uiso ? Si
Si80	1.0	0.005056	0.625055	0.999891	Uiso ? Si
Si81	1.0	0.996265	0.777898	0.996663	Uiso ? Si
Si82	1.0	0.042741	0.817146	0.786918	Uiso ? Si
Si83	1.0	0.015746	0.701731	0.639099	Uiso ? Si
Si84	1.0	0.622703	0.453782	0.638288	Uiso ? Si
Si85	1.0	0.653863	0.572838	0.778944	Uiso ? Si
Si86	1.0	0.613765	0.604364	0.996582	Uiso ? Si
Si87	1.0	0.611576	0.759398	0.998493	Uiso ? Si
Si88	1.0	0.652981	0.805946	0.785175	Uiso ? Si
Si89	1.0	0.605543	0.693760	0.648556	Uiso ? Si
Si90	1.0	0.838598	0.465369	0.657128	Uiso ? Si

Si91	1.0	0.810455	0.582464	0.809748	Uiso ? Si
Si92	1.0	0.846013	0.620223	0.021583	Uiso ? Si
Si93	1.0	0.840437	0.774905	0.998920	Uiso ? Si
Si94	1.0	0.807754	0.813963	0.771240	Uiso ? Si
Si95	1.0	0.862537	0.689759	0.671435	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.454414	0.485559	0.703993	Uiso ? Cu

• **mfi-10mr-co.cif**

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C1 O193 Al1 Si95 Cu1'
_cell_length_a             19.562939
_cell_length_b             19.882572
_cell_length_c             13.284167
_cell_angle_alpha         89.666168
_cell_angle_beta          91.539055
_cell_angle_gamma         89.847328
_cell_volume               5165.057923
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.439865  0.511749  0.824617  Uiso ? C
O1      1.0  0.755647  0.748151  0.238722  Uiso ? O
O2      1.0  0.750393  0.692982  0.415664  Uiso ? O
O3      1.0  0.709563  0.581674  0.505557  Uiso ? O
O4      1.0  0.748638  0.484675  0.376592  Uiso ? O
O5      1.0  0.725672  0.499577  0.177642  Uiso ? O
O6      1.0  0.720928  0.619756  0.253530  Uiso ? O
O7      1.0  0.524426  0.736357  0.190769  Uiso ? O
O8      1.0  0.507522  0.694202  0.373986  Uiso ? O
O9      1.0  0.524591  0.576726  0.462994  Uiso ? O
O10     1.0  0.514258  0.440077  0.398356  Uiso ? O
O11     1.0  0.511541  0.488076  0.207490  Uiso ? O

```

012	1.0	0.561192	0.612831	0.234221	Uiso ? 0
013	1.0	0.633837	0.712463	0.312182	Uiso ? 0
014	1.0	0.627170	0.463519	0.299957	Uiso ? 0
015	1.0	0.794544	0.808818	0.070644	Uiso ? 0
016	1.0	0.669148	0.755211	0.088236	Uiso ? 0
017	1.0	0.547204	0.797710	0.020954	Uiso ? 0
018	1.0	0.815957	0.590783	0.121303	Uiso ? 0
019	1.0	0.689077	0.601343	0.057055	Uiso ? 0
020	1.0	0.559314	0.559784	0.053091	Uiso ? 0
021	1.0	0.728065	0.380030	0.253283	Uiso ? 0
022	1.0	0.545380	0.361537	0.246959	Uiso ? 0
023	1.0	0.428030	0.814507	0.104645	Uiso ? 0
024	1.0	0.442682	0.590760	0.136489	Uiso ? 0
025	1.0	0.422396	0.657236	0.514797	Uiso ? 0
026	1.0	0.422150	0.494602	0.550881	Uiso ? 0
027	1.0	0.118502	0.759103	0.200728	Uiso ? 0
028	1.0	0.140218	0.702729	0.379193	Uiso ? 0
029	1.0	0.102484	0.583258	0.448994	Uiso ? 0
030	1.0	0.126573	0.456070	0.404406	Uiso ? 0
031	1.0	0.108704	0.495776	0.211904	Uiso ? 0
032	1.0	0.119963	0.627457	0.219548	Uiso ? 0
033	1.0	0.354865	0.755547	0.245751	Uiso ? 0
034	1.0	0.309519	0.698050	0.414337	Uiso ? 0
035	1.0	0.316495	0.574508	0.492575	Uiso ? 0
036	1.0	0.351663	0.466879	0.387700	Uiso ? 0
037	1.0	0.348323	0.500176	0.192888	Uiso ? 0
038	1.0	0.348390	0.622147	0.267604	Uiso ? 0
039	1.0	0.235541	0.696192	0.241377	Uiso ? 0
040	1.0	0.233082	0.479818	0.290862	Uiso ? 0
041	1.0	0.049538	0.824913	0.054131	Uiso ? 0
042	1.0	0.182195	0.804248	0.037250	Uiso ? 0
043	1.0	0.310422	0.762019	0.054962	Uiso ? 0
044	1.0	0.058634	0.570386	0.062168	Uiso ? 0
045	1.0	0.192639	0.557036	0.089526	Uiso ? 0
046	1.0	0.318150	0.605103	0.072883	Uiso ? 0
047	1.0	0.153011	0.373539	0.259139	Uiso ? 0
048	1.0	0.315741	0.377391	0.248778	Uiso ? 0
049	1.0	0.603005	0.999914	0.691122	Uiso ? 0
050	1.0	0.603829	0.057924	0.515317	Uiso ? 0
051	1.0	0.643344	0.171364	0.424876	Uiso ? 0
052	1.0	0.602905	0.268620	0.548113	Uiso ? 0
053	1.0	0.641462	0.252866	0.743281	Uiso ? 0
054	1.0	0.628600	0.130851	0.675661	Uiso ? 0
055	1.0	0.832514	0.020670	0.732802	Uiso ? 0
056	1.0	0.845264	0.072911	0.552730	Uiso ? 0
057	1.0	0.826464	0.184527	0.445125	Uiso ? 0
058	1.0	0.858274	0.289446	0.561590	Uiso ? 0
059	1.0	0.822455	0.267820	0.751521	Uiso ? 0
060	1.0	0.791301	0.144286	0.700415	Uiso ? 0
061	1.0	0.721527	0.043770	0.616898	Uiso ? 0

062	1.0	0.728810	0.293696	0.605621	Uiso ? 0
063	1.0	0.555028	0.947184	0.858900	Uiso ? 0
064	1.0	0.684880	0.988226	0.847670	Uiso ? 0
065	1.0	0.810972	0.961579	0.906922	Uiso ? 0
066	1.0	0.543658	0.174204	0.813223	Uiso ? 0
067	1.0	0.670752	0.149786	0.865812	Uiso ? 0
068	1.0	0.802109	0.177341	0.894878	Uiso ? 0
069	1.0	0.627023	0.372006	0.670726	Uiso ? 0
070	1.0	0.809414	0.388461	0.678991	Uiso ? 0
071	1.0	0.927525	0.943110	0.818576	Uiso ? 0
072	1.0	0.912468	0.169919	0.789837	Uiso ? 0
073	1.0	0.933468	0.105820	0.415217	Uiso ? 0
074	1.0	0.930337	0.265443	0.399826	Uiso ? 0
075	1.0	0.236155	0.006703	0.734400	Uiso ? 0
076	1.0	0.221500	0.063237	0.554913	Uiso ? 0
077	1.0	0.252494	0.184317	0.485904	Uiso ? 0
078	1.0	0.214649	0.307953	0.532892	Uiso ? 0
079	1.0	0.249759	0.269643	0.722522	Uiso ? 0
080	1.0	0.239445	0.137871	0.716306	Uiso ? 0
081	1.0	0.003625	0.009942	0.688022	Uiso ? 0
082	1.0	0.045813	0.064161	0.516463	Uiso ? 0
083	1.0	0.038607	0.189301	0.445656	Uiso ? 0
084	1.0	0.018468	0.306384	0.538837	Uiso ? 0
085	1.0	0.995071	0.266864	0.727765	Uiso ? 0
086	1.0	0.006832	0.143053	0.658294	Uiso ? 0
087	1.0	0.122021	0.072751	0.687008	Uiso ? 0
088	1.0	0.120736	0.286948	0.669401	Uiso ? 0
089	1.0	0.303392	0.944823	0.885340	Uiso ? 0
090	1.0	0.169358	0.958699	0.894037	Uiso ? 0
091	1.0	0.040883	0.999862	0.881145	Uiso ? 0
092	1.0	0.306565	0.197381	0.868027	Uiso ? 0
093	1.0	0.170906	0.207057	0.851611	Uiso ? 0
094	1.0	0.040767	0.166124	0.847944	Uiso ? 0
095	1.0	0.203804	0.392400	0.681174	Uiso ? 0
096	1.0	0.036577	0.391427	0.686813	Uiso ? 0
097	1.0	0.110236	0.258970	0.186178	Uiso ? 0
098	1.0	0.100747	0.195328	0.018016	Uiso ? 0
099	1.0	0.141078	0.086783	0.920838	Uiso ? 0
0100	1.0	0.105206	0.994965	0.057690	Uiso ? 0
0101	1.0	0.144111	0.005156	0.252732	Uiso ? 0
0102	1.0	0.132995	0.127371	0.184431	Uiso ? 0
0103	1.0	0.328978	0.246918	0.216906	Uiso ? 0
0104	1.0	0.349859	0.173936	0.056600	Uiso ? 0
0105	1.0	0.324333	0.071949	0.931727	Uiso ? 0
0106	1.0	0.361443	0.976473	0.063153	Uiso ? 0
0107	1.0	0.328429	0.991328	0.254020	Uiso ? 0
0108	1.0	0.292666	0.118448	0.216071	Uiso ? 0
0109	1.0	0.223526	0.207198	0.103924	Uiso ? 0
0110	1.0	0.232727	0.972337	0.111691	Uiso ? 0
0111	1.0	0.055056	0.305536	0.350936	Uiso ? 0

0112	1.0	0.184291	0.258900	0.352310	Uiso ? 0
0113	1.0	0.312020	0.290793	0.402395	Uiso ? 0
0114	1.0	0.046473	0.086014	0.320204	Uiso ? 0
0115	1.0	0.173549	0.105431	0.376584	Uiso ? 0
0116	1.0	0.305045	0.074331	0.403943	Uiso ? 0
0117	1.0	0.136898	0.887773	0.173429	Uiso ? 0
0118	1.0	0.314933	0.872145	0.169515	Uiso ? 0
0119	1.0	0.427610	0.313426	0.311562	Uiso ? 0
0120	1.0	0.415199	0.090843	0.296989	Uiso ? 0
0121	1.0	0.431048	0.151296	0.906920	Uiso ? 0
0122	1.0	0.430371	0.990504	0.897471	Uiso ? 0
0123	1.0	0.735323	0.251072	0.222154	Uiso ? 0
0124	1.0	0.717809	0.192318	0.044021	Uiso ? 0
0125	1.0	0.746653	0.069525	0.979053	Uiso ? 0
0126	1.0	0.710966	0.947522	0.034872	Uiso ? 0
0127	1.0	0.751523	0.989123	0.220724	Uiso ? 0
0128	1.0	0.738417	0.120227	0.208059	Uiso ? 0
0129	1.0	0.499947	0.245153	0.180585	Uiso ? 0
0130	1.0	0.542798	0.191622	0.010241	Uiso ? 0
0131	1.0	0.537886	0.068371	0.935885	Uiso ? 0
0132	1.0	0.516894	0.958216	0.045897	Uiso ? 0
0133	1.0	0.496066	0.991853	0.236819	Uiso ? 0
0134	1.0	0.507056	0.112559	0.156722	Uiso ? 0
0135	1.0	0.620525	0.185697	0.179716	Uiso ? 0
0136	1.0	0.621446	0.973370	0.174583	Uiso ? 0
0137	1.0	0.803286	0.307373	0.377352	Uiso ? 0
0138	1.0	0.668723	0.298499	0.381476	Uiso ? 0
0139	1.0	0.541310	0.254386	0.371610	Uiso ? 0
0140	1.0	0.811228	0.065001	0.358417	Uiso ? 0
0141	1.0	0.675852	0.053051	0.352174	Uiso ? 0
0142	1.0	0.545004	0.094667	0.346559	Uiso ? 0
0143	1.0	0.703872	0.866175	0.187937	Uiso ? 0
0144	1.0	0.537199	0.869197	0.190259	Uiso ? 0
0145	1.0	0.251164	0.510482	0.735223	Uiso ? 0
0146	1.0	0.251198	0.565134	0.912057	Uiso ? 0
0147	1.0	0.210999	0.676181	0.004879	Uiso ? 0
0148	1.0	0.250906	0.770894	0.876162	Uiso ? 0
0149	1.0	0.214480	0.761387	0.679290	Uiso ? 0
0150	1.0	0.224184	0.640282	0.751220	Uiso ? 0
0151	1.0	0.013829	0.518734	0.728695	Uiso ? 0
0152	1.0	0.012658	0.600589	0.879168	Uiso ? 0
0153	1.0	0.032736	0.698106	0.010554	Uiso ? 0
0154	1.0	0.996309	0.791229	0.873776	Uiso ? 0
0155	1.0	0.023776	0.771574	0.682800	Uiso ? 0
0156	1.0	0.062599	0.643342	0.707419	Uiso ? 0
0157	1.0	0.132354	0.553176	0.814503	Uiso ? 0
0158	1.0	0.124131	0.791126	0.818197	Uiso ? 0
0159	1.0	0.292528	0.454123	0.566047	Uiso ? 0
0160	1.0	0.165017	0.503741	0.583246	Uiso ? 0
0161	1.0	0.034841	0.484529	0.539095	Uiso ? 0

0162	1.0	0.311155	0.679746	0.612571	Uiso ? O
0163	1.0	0.184182	0.658715	0.558572	Uiso ? O
0164	1.0	0.055020	0.697322	0.526616	Uiso ? O
0165	1.0	0.221231	0.877876	0.761226	Uiso ? O
0166	1.0	0.044066	0.892124	0.760507	Uiso ? O
0167	1.0	0.921471	0.450003	0.624854	Uiso ? O
0168	1.0	0.941509	0.672508	0.621180	Uiso ? O
0169	1.0	0.931876	0.612498	0.034847	Uiso ? O
0170	1.0	0.923130	0.777345	0.034993	Uiso ? O
0171	1.0	0.659604	0.494176	0.724969	Uiso ? O
0172	1.0	0.626749	0.560958	0.886846	Uiso ? O
0173	1.0	0.595044	0.677567	0.968054	Uiso ? O
0174	1.0	0.650927	0.792359	0.900612	Uiso ? O
0175	1.0	0.604207	0.751027	0.721875	Uiso ? O
0176	1.0	0.609486	0.617885	0.706498	Uiso ? O
0177	1.0	0.835536	0.509040	0.749878	Uiso ? O
0178	1.0	0.826259	0.566165	0.925683	Uiso ? O
0179	1.0	0.823574	0.691050	0.989757	Uiso ? O
0180	1.0	0.836535	0.802483	0.883238	Uiso ? O
0181	1.0	0.858467	0.764048	0.693116	Uiso ? O
0182	1.0	0.861096	0.640731	0.770485	Uiso ? O
0183	1.0	0.734815	0.598018	0.780352	Uiso ? O
0184	1.0	0.734153	0.782062	0.750909	Uiso ? O
0185	1.0	0.547845	0.473118	0.609457	Uiso ? O
0186	1.0	0.671655	0.456629	0.533414	Uiso ? O
0187	1.0	0.803481	0.493452	0.556130	Uiso ? O
0188	1.0	0.545150	0.690883	0.567291	Uiso ? O
0189	1.0	0.680546	0.697945	0.583661	Uiso ? O
0190	1.0	0.810295	0.657287	0.586207	Uiso ? O
0191	1.0	0.641064	0.878739	0.749334	Uiso ? O
0192	1.0	0.816447	0.888339	0.737180	Uiso ? O
0193	1.0	0.424838	0.522767	0.903950	Uiso ? O
Al1	1.0	0.504507	0.495454	0.494513	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.731370	0.795400	0.144629	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.714475	0.693229	0.304571	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.738266	0.657499	0.523593	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.732946	0.503900	0.491857	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.707176	0.456757	0.277421	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.737296	0.578284	0.152556	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.508850	0.804373	0.127782	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.557025	0.688897	0.278770	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.500939	0.652717	0.479518	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.548692	0.438185	0.290664	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.519373	0.562307	0.159075	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.121995	0.817772	0.116378	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.153678	0.696441	0.260129	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.120518	0.660648	0.478543	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.107141	0.507254	0.493290	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.155059	0.451684	0.291078	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.120005	0.563333	0.145458	Uiso ? Si



Si18	1.0	0.351814	0.801339	0.143819	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.312039	0.693636	0.292752	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.340756	0.652432	0.507248	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.345562	0.497853	0.499759	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.312249	0.456073	0.279871	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.364513	0.578459	0.167550	Uiso ? Si
Si24	1.0	0.620917	0.952868	0.788172	Uiso ? Si
Si25	1.0	0.639851	0.057799	0.626032	Uiso ? Si
Si26	1.0	0.616917	0.094434	0.408448	Uiso ? Si
Si27	1.0	0.614173	0.247984	0.431475	Uiso ? Si
Si28	1.0	0.650010	0.296721	0.641137	Uiso ? Si
Si29	1.0	0.621685	0.176819	0.774462	Uiso ? Si
Si30	1.0	0.846496	0.953217	0.798319	Uiso ? Si
Si31	1.0	0.797175	0.070022	0.649903	Uiso ? Si
Si32	1.0	0.853800	0.107098	0.442605	Uiso ? Si
Si33	1.0	0.854459	0.261678	0.446157	Uiso ? Si
Si34	1.0	0.805343	0.309916	0.649047	Uiso ? Si
Si35	1.0	0.832289	0.189740	0.784187	Uiso ? Si
Si36	1.0	0.232423	0.948280	0.818926	Uiso ? Si
Si37	1.0	0.204447	0.070183	0.673012	Uiso ? Si
Si38	1.0	0.238095	0.106452	0.454976	Uiso ? Si
Si39	1.0	0.241198	0.260253	0.443688	Uiso ? Si
Si40	1.0	0.197849	0.313826	0.651508	Uiso ? Si
Si41	1.0	0.241440	0.201995	0.790528	Uiso ? Si
Si42	1.0	0.004270	0.961357	0.786911	Uiso ? Si
Si43	1.0	0.044998	0.071658	0.637847	Uiso ? Si
Si44	1.0	0.015404	0.111609	0.425151	Uiso ? Si
Si45	1.0	0.010580	0.266214	0.433992	Uiso ? Si
Si46	1.0	0.042160	0.312889	0.655712	Uiso ? Si
Si47	1.0	0.989091	0.187581	0.756719	Uiso ? Si
Si48	1.0	0.125079	0.299869	0.289020	Uiso ? Si
Si49	1.0	0.142450	0.197324	0.124421	Uiso ? Si
Si50	1.0	0.113332	0.163761	0.908194	Uiso ? Si
Si51	1.0	0.114045	0.010488	0.938597	Uiso ? Si
Si52	1.0	0.154364	0.965291	0.148242	Uiso ? Si
Si53	1.0	0.124882	0.081353	0.283611	Uiso ? Si
Si54	1.0	0.346152	0.306986	0.294512	Uiso ? Si
Si55	1.0	0.298808	0.186826	0.148659	Uiso ? Si
Si56	1.0	0.352584	0.148775	0.940754	Uiso ? Si
Si57	1.0	0.354811	0.995828	0.943985	Uiso ? Si
Si58	1.0	0.309691	0.952409	0.149940	Uiso ? Si
Si59	1.0	0.335703	0.068396	0.292326	Uiso ? Si
Si60	1.0	0.733441	0.307821	0.308792	Uiso ? Si
Si61	1.0	0.702683	0.187538	0.163213	Uiso ? Si
Si62	1.0	0.734249	0.147539	0.946118	Uiso ? Si
Si63	1.0	0.738581	0.992190	0.942707	Uiso ? Si
Si64	1.0	0.697746	0.944395	0.154935	Uiso ? Si
Si65	1.0	0.744089	0.057640	0.285854	Uiso ? Si
Si66	1.0	0.503937	0.294264	0.278170	Uiso ? Si
Si67	1.0	0.543052	0.184441	0.131862	Uiso ? Si

Si68	1.0	0.513170	0.145986	0.917474	Uiso	? Si
Si69	1.0	0.510049	0.991283	0.935102	Uiso	? Si
Si70	1.0	0.542737	0.948379	0.161472	Uiso	? Si
Si71	1.0	0.490875	0.071773	0.260116	Uiso	? Si
Si72	1.0	0.228300	0.464656	0.639300	Uiso	? Si
Si73	1.0	0.213652	0.567237	0.802176	Uiso	? Si
Si74	1.0	0.243035	0.600953	0.020341	Uiso	? Si
Si75	1.0	0.238544	0.753146	0.993782	Uiso	? Si
Si76	1.0	0.202834	0.800346	0.784283	Uiso	? Si
Si77	1.0	0.233012	0.684767	0.650045	Uiso	? Si
Si78	1.0	0.002159	0.461130	0.644807	Uiso	? Si
Si79	1.0	0.055798	0.578885	0.782528	Uiso	? Si
Si80	1.0	0.009168	0.620193	0.996965	Uiso	? Si
Si81	1.0	0.000153	0.773004	0.993375	Uiso	? Si
Si82	1.0	0.046766	0.811980	0.783665	Uiso	? Si
Si83	1.0	0.020097	0.696645	0.635626	Uiso	? Si
Si84	1.0	0.626260	0.449541	0.634248	Uiso	? Si
Si85	1.0	0.657574	0.568185	0.775178	Uiso	? Si
Si86	1.0	0.617621	0.600053	0.992689	Uiso	? Si
Si87	1.0	0.615077	0.755055	0.993472	Uiso	? Si
Si88	1.0	0.656621	0.801301	0.779884	Uiso	? Si
Si89	1.0	0.610037	0.688746	0.643716	Uiso	? Si
Si90	1.0	0.842571	0.460775	0.653102	Uiso	? Si
Si91	1.0	0.814290	0.577650	0.805662	Uiso	? Si
Si92	1.0	0.849952	0.615288	0.017634	Uiso	? Si
Si93	1.0	0.844393	0.770036	0.994419	Uiso	? Si
Si94	1.0	0.811683	0.808937	0.766520	Uiso	? Si
Si95	1.0	0.866701	0.684689	0.666988	Uiso	? Si
Cu1	1.0	0.463871	0.494539	0.694386	Uiso	? Cu

- **mfi-10mr.cif**

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'O192 Al1 Si95 Cu1'
_cell_length_a              19.576097
_cell_length_b              19.883204
_cell_length_c              13.285814
_cell_angle_alpha           89.710564
_cell_angle_beta            91.494629
_cell_angle_gamma           89.866585
_cell_volume                 5169.469939
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz

```

'x, y, z'

loop\_

\_atom\_site\_label

\_atom\_site\_occupancy

\_atom\_site\_fract\_x

\_atom\_site\_fract\_y

\_atom\_site\_fract\_z

\_atom\_site\_adp\_type

\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv

\_atom\_site\_type\_symbol

01	1.0	0.755785	0.749546	0.240383	Uiso ? O
02	1.0	0.750561	0.693204	0.416129	Uiso ? O
03	1.0	0.709734	0.582426	0.507603	Uiso ? O
04	1.0	0.749449	0.486741	0.376792	Uiso ? O
05	1.0	0.725336	0.500548	0.178127	Uiso ? O
06	1.0	0.721076	0.620946	0.253151	Uiso ? O
07	1.0	0.524469	0.737312	0.192479	Uiso ? O
08	1.0	0.508119	0.694963	0.375928	Uiso ? O
09	1.0	0.525605	0.578335	0.467865	Uiso ? O
010	1.0	0.513672	0.442858	0.399150	Uiso ? O
011	1.0	0.512460	0.488879	0.207346	Uiso ? O
012	1.0	0.560638	0.613700	0.235252	Uiso ? O
013	1.0	0.634005	0.713120	0.313012	Uiso ? O
014	1.0	0.627466	0.465236	0.302476	Uiso ? O
015	1.0	0.795321	0.809402	0.072209	Uiso ? O
016	1.0	0.669914	0.755759	0.089370	Uiso ? O
017	1.0	0.548109	0.798429	0.022456	Uiso ? O
018	1.0	0.816215	0.591253	0.121390	Uiso ? O
019	1.0	0.689669	0.602055	0.056767	Uiso ? O
020	1.0	0.559884	0.561106	0.053438	Uiso ? O
021	1.0	0.727848	0.381434	0.255133	Uiso ? O
022	1.0	0.546109	0.363013	0.249528	Uiso ? O
023	1.0	0.428395	0.814608	0.104543	Uiso ? O
024	1.0	0.442684	0.590695	0.135787	Uiso ? O
025	1.0	0.421772	0.658079	0.514373	Uiso ? O
026	1.0	0.420762	0.494150	0.549641	Uiso ? O
027	1.0	0.118386	0.759263	0.200197	Uiso ? O
028	1.0	0.139976	0.702640	0.378545	Uiso ? O
029	1.0	0.101450	0.583433	0.448583	Uiso ? O
030	1.0	0.126345	0.456552	0.402676	Uiso ? O
031	1.0	0.108057	0.496026	0.210216	Uiso ? O
032	1.0	0.119457	0.627651	0.218746	Uiso ? O
033	1.0	0.354451	0.755669	0.244666	Uiso ? O
034	1.0	0.309165	0.698339	0.413275	Uiso ? O
035	1.0	0.316185	0.574852	0.490703	Uiso ? O
036	1.0	0.350180	0.466598	0.386187	Uiso ? O
037	1.0	0.348242	0.500215	0.191640	Uiso ? O
038	1.0	0.348059	0.622310	0.266462	Uiso ? O
039	1.0	0.235205	0.696173	0.240504	Uiso ? O

040	1.0	0.232447	0.479796	0.288070	Uiso ? 0
041	1.0	0.050001	0.825152	0.053389	Uiso ? 0
042	1.0	0.182638	0.804532	0.037186	Uiso ? 0
043	1.0	0.310851	0.762466	0.053514	Uiso ? 0
044	1.0	0.058777	0.570873	0.060531	Uiso ? 0
045	1.0	0.192597	0.557537	0.088999	Uiso ? 0
046	1.0	0.318250	0.604890	0.071599	Uiso ? 0
047	1.0	0.152114	0.373713	0.257348	Uiso ? 0
048	1.0	0.315400	0.377242	0.247019	Uiso ? 0
049	1.0	0.603958	0.000325	0.691388	Uiso ? 0
050	1.0	0.604345	0.058704	0.515986	Uiso ? 0
051	1.0	0.642872	0.172403	0.425809	Uiso ? 0
052	1.0	0.602996	0.269572	0.549771	Uiso ? 0
053	1.0	0.641849	0.253154	0.744773	Uiso ? 0
054	1.0	0.628875	0.131312	0.676884	Uiso ? 0
055	1.0	0.832770	0.021413	0.733261	Uiso ? 0
056	1.0	0.846160	0.074489	0.553984	Uiso ? 0
057	1.0	0.826520	0.185161	0.444519	Uiso ? 0
058	1.0	0.858755	0.289760	0.561604	Uiso ? 0
059	1.0	0.823661	0.268973	0.751941	Uiso ? 0
060	1.0	0.791804	0.145230	0.701960	Uiso ? 0
061	1.0	0.722197	0.045104	0.616993	Uiso ? 0
062	1.0	0.729528	0.292149	0.606216	Uiso ? 0
063	1.0	0.555878	0.948265	0.859697	Uiso ? 0
064	1.0	0.685462	0.989928	0.848238	Uiso ? 0
065	1.0	0.811362	0.962526	0.907473	Uiso ? 0
066	1.0	0.544047	0.174748	0.814623	Uiso ? 0
067	1.0	0.671024	0.150164	0.867230	Uiso ? 0
068	1.0	0.802102	0.179172	0.895860	Uiso ? 0
069	1.0	0.629794	0.372236	0.672863	Uiso ? 0
070	1.0	0.808238	0.389099	0.677246	Uiso ? 0
071	1.0	0.927849	0.944139	0.819164	Uiso ? 0
072	1.0	0.912867	0.170786	0.791674	Uiso ? 0
073	1.0	0.933178	0.106114	0.414267	Uiso ? 0
074	1.0	0.930319	0.266159	0.399383	Uiso ? 0
075	1.0	0.235424	0.007179	0.733378	Uiso ? 0
076	1.0	0.220789	0.064049	0.554227	Uiso ? 0
077	1.0	0.252864	0.184754	0.484488	Uiso ? 0
078	1.0	0.214867	0.308148	0.532661	Uiso ? 0
079	1.0	0.249884	0.270159	0.722291	Uiso ? 0
080	1.0	0.239583	0.138350	0.715759	Uiso ? 0
081	1.0	0.003625	0.010834	0.688272	Uiso ? 0
082	1.0	0.045242	0.064879	0.516481	Uiso ? 0
083	1.0	0.038283	0.189626	0.444811	Uiso ? 0
084	1.0	0.017797	0.305998	0.539831	Uiso ? 0
085	1.0	0.995658	0.267559	0.729414	Uiso ? 0
086	1.0	0.006411	0.143944	0.658595	Uiso ? 0
087	1.0	0.121724	0.074050	0.686680	Uiso ? 0
088	1.0	0.120880	0.286892	0.668912	Uiso ? 0
089	1.0	0.303801	0.945522	0.883339	Uiso ? 0

090	1.0	0.169905	0.959136	0.894007	Uiso ? 0
091	1.0	0.041510	0.000422	0.881029	Uiso ? 0
092	1.0	0.307076	0.197868	0.867104	Uiso ? 0
093	1.0	0.171423	0.207362	0.851741	Uiso ? 0
094	1.0	0.041369	0.166188	0.848050	Uiso ? 0
095	1.0	0.203609	0.392668	0.680731	Uiso ? 0
096	1.0	0.037460	0.391832	0.686497	Uiso ? 0
097	1.0	0.108893	0.258349	0.187420	Uiso ? 0
098	1.0	0.101250	0.195973	0.017982	Uiso ? 0
099	1.0	0.141641	0.087172	0.921316	Uiso ? 0
0100	1.0	0.105457	0.995074	0.057627	Uiso ? 0
0101	1.0	0.144242	0.005259	0.252753	Uiso ? 0
0102	1.0	0.132736	0.127052	0.183564	Uiso ? 0
0103	1.0	0.330154	0.246640	0.217392	Uiso ? 0
0104	1.0	0.348901	0.174320	0.056194	Uiso ? 0
0105	1.0	0.324776	0.072436	0.930555	Uiso ? 0
0106	1.0	0.361217	0.976746	0.061823	Uiso ? 0
0107	1.0	0.328874	0.991545	0.252963	Uiso ? 0
0108	1.0	0.292435	0.118563	0.215881	Uiso ? 0
0109	1.0	0.223251	0.208407	0.106057	Uiso ? 0
0110	1.0	0.232793	0.972531	0.111482	Uiso ? 0
0111	1.0	0.055379	0.306445	0.352449	Uiso ? 0
0112	1.0	0.184587	0.259837	0.351677	Uiso ? 0
0113	1.0	0.312181	0.291685	0.402039	Uiso ? 0
0114	1.0	0.046336	0.085938	0.319986	Uiso ? 0
0115	1.0	0.173159	0.106270	0.375904	Uiso ? 0
0116	1.0	0.304269	0.073911	0.403332	Uiso ? 0
0117	1.0	0.137015	0.887906	0.173281	Uiso ? 0
0118	1.0	0.315181	0.872394	0.168484	Uiso ? 0
0119	1.0	0.427742	0.314804	0.311586	Uiso ? 0
0120	1.0	0.414759	0.091376	0.297671	Uiso ? 0
0121	1.0	0.431362	0.152396	0.908019	Uiso ? 0
0122	1.0	0.430839	0.990993	0.896934	Uiso ? 0
0123	1.0	0.734638	0.252750	0.222705	Uiso ? 0
0124	1.0	0.717975	0.193167	0.045218	Uiso ? 0
0125	1.0	0.747714	0.070643	0.979952	Uiso ? 0
0126	1.0	0.711194	0.948624	0.035048	Uiso ? 0
0127	1.0	0.751142	0.990458	0.220751	Uiso ? 0
0128	1.0	0.739802	0.121951	0.209936	Uiso ? 0
0129	1.0	0.501250	0.246716	0.181799	Uiso ? 0
0130	1.0	0.543088	0.192443	0.011566	Uiso ? 0
0131	1.0	0.537807	0.069112	0.937436	Uiso ? 0
0132	1.0	0.516401	0.958744	0.046373	Uiso ? 0
0133	1.0	0.496209	0.992943	0.237340	Uiso ? 0
0134	1.0	0.506706	0.113926	0.158184	Uiso ? 0
0135	1.0	0.620920	0.185456	0.180957	Uiso ? 0
0136	1.0	0.621259	0.974119	0.174240	Uiso ? 0
0137	1.0	0.803201	0.308228	0.378025	Uiso ? 0
0138	1.0	0.668711	0.299477	0.383060	Uiso ? 0
0139	1.0	0.541083	0.255856	0.373510	Uiso ? 0

0140	1.0	0.810374	0.064877	0.360633	Uiso ? 0
0141	1.0	0.674944	0.054373	0.351337	Uiso ? 0
0142	1.0	0.544235	0.095666	0.348281	Uiso ? 0
0143	1.0	0.704028	0.867268	0.188096	Uiso ? 0
0144	1.0	0.536779	0.870154	0.191168	Uiso ? 0
0145	1.0	0.250304	0.511055	0.733884	Uiso ? 0
0146	1.0	0.250498	0.565344	0.911143	Uiso ? 0
0147	1.0	0.211321	0.676574	0.004287	Uiso ? 0
0148	1.0	0.250617	0.771367	0.875271	Uiso ? 0
0149	1.0	0.213824	0.761747	0.678475	Uiso ? 0
0150	1.0	0.223499	0.640831	0.750636	Uiso ? 0
0151	1.0	0.013732	0.519409	0.726598	Uiso ? 0
0152	1.0	0.011828	0.600510	0.878115	Uiso ? 0
0153	1.0	0.032938	0.698473	0.008747	Uiso ? 0
0154	1.0	0.996131	0.792091	0.873245	Uiso ? 0
0155	1.0	0.023724	0.772348	0.682153	Uiso ? 0
0156	1.0	0.062081	0.644181	0.707015	Uiso ? 0
0157	1.0	0.131728	0.553720	0.813605	Uiso ? 0
0158	1.0	0.123891	0.791900	0.817787	Uiso ? 0
0159	1.0	0.291700	0.454539	0.565112	Uiso ? 0
0160	1.0	0.163952	0.503555	0.582106	Uiso ? 0
0161	1.0	0.034121	0.483819	0.537390	Uiso ? 0
0162	1.0	0.310248	0.679956	0.611408	Uiso ? 0
0163	1.0	0.183406	0.658686	0.558087	Uiso ? 0
0164	1.0	0.054654	0.697858	0.525926	Uiso ? 0
0165	1.0	0.221121	0.878302	0.760427	Uiso ? 0
0166	1.0	0.043985	0.892863	0.759946	Uiso ? 0
0167	1.0	0.921604	0.448798	0.625770	Uiso ? 0
0168	1.0	0.941196	0.673421	0.620394	Uiso ? 0
0169	1.0	0.932038	0.613205	0.034845	Uiso ? 0
0170	1.0	0.923630	0.777698	0.035187	Uiso ? 0
0171	1.0	0.660251	0.495161	0.724766	Uiso ? 0
0172	1.0	0.627443	0.561926	0.886705	Uiso ? 0
0173	1.0	0.595966	0.678596	0.968295	Uiso ? 0
0174	1.0	0.651956	0.793629	0.902182	Uiso ? 0
0175	1.0	0.604869	0.752092	0.723776	Uiso ? 0
0176	1.0	0.610323	0.619022	0.706478	Uiso ? 0
0177	1.0	0.835914	0.509078	0.750299	Uiso ? 0
0178	1.0	0.826579	0.566755	0.925732	Uiso ? 0
0179	1.0	0.823831	0.691714	0.990122	Uiso ? 0
0180	1.0	0.836621	0.803614	0.884584	Uiso ? 0
0181	1.0	0.859297	0.764755	0.694907	Uiso ? 0
0182	1.0	0.861860	0.640849	0.770401	Uiso ? 0
0183	1.0	0.735543	0.598702	0.780129	Uiso ? 0
0184	1.0	0.734819	0.782618	0.751812	Uiso ? 0
0185	1.0	0.549355	0.470641	0.609344	Uiso ? 0
0186	1.0	0.673810	0.456570	0.533943	Uiso ? 0
0187	1.0	0.804979	0.495066	0.556098	Uiso ? 0
0188	1.0	0.543958	0.693221	0.570151	Uiso ? 0
0189	1.0	0.679538	0.699483	0.582690	Uiso ? 0

O190	1.0	0.809583	0.659046	0.587508	Uiso ? O
O191	1.0	0.642385	0.879722	0.750907	Uiso ? O
O192	1.0	0.816939	0.889052	0.737993	Uiso ? O
Al1	1.0	0.504620	0.497120	0.497266	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.731842	0.796325	0.145740	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.714603	0.694090	0.305184	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.737843	0.658620	0.524456	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.734141	0.505109	0.492510	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.707240	0.458328	0.278616	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.737484	0.579116	0.152522	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.509098	0.805001	0.128756	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.557105	0.689705	0.280176	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.500885	0.654231	0.481977	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.548970	0.439990	0.292253	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.519621	0.563215	0.159122	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.122223	0.817941	0.115969	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.153406	0.696516	0.259439	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.119927	0.660795	0.477921	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.106318	0.507240	0.491924	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.154425	0.451910	0.289124	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.119748	0.563708	0.144241	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.351990	0.801530	0.142879	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.311679	0.693768	0.291737	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.340282	0.652811	0.506283	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.344540	0.498005	0.497899	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.311583	0.456015	0.277876	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.364453	0.578562	0.166553	Uiso ? Si
Si24	1.0	0.621804	0.953880	0.789029	Uiso ? Si
Si25	1.0	0.640492	0.058505	0.626539	Uiso ? Si
Si26	1.0	0.616518	0.095479	0.409079	Uiso ? Si
Si27	1.0	0.614028	0.249080	0.432898	Uiso ? Si
Si28	1.0	0.651049	0.296612	0.642492	Uiso ? Si
Si29	1.0	0.622065	0.177114	0.775891	Uiso ? Si
Si30	1.0	0.846878	0.954075	0.798883	Uiso ? Si
Si31	1.0	0.797739	0.071147	0.650786	Uiso ? Si
Si32	1.0	0.853777	0.107698	0.443048	Uiso ? Si
Si33	1.0	0.854539	0.262300	0.445992	Uiso ? Si
Si34	1.0	0.805761	0.310172	0.648960	Uiso ? Si
Si35	1.0	0.832821	0.190943	0.785362	Uiso ? Si
Si36	1.0	0.232468	0.948764	0.817960	Uiso ? Si
Si37	1.0	0.204043	0.070900	0.672420	Uiso ? Si
Si38	1.0	0.237716	0.106891	0.454150	Uiso ? Si
Si39	1.0	0.241420	0.260818	0.442992	Uiso ? Si
Si40	1.0	0.197852	0.314052	0.651166	Uiso ? Si
Si41	1.0	0.241722	0.202410	0.790147	Uiso ? Si
Si42	1.0	0.004502	0.962138	0.786958	Uiso ? Si
Si43	1.0	0.044673	0.072630	0.637836	Uiso ? Si
Si44	1.0	0.015069	0.111903	0.424646	Uiso ? Si
Si45	1.0	0.010376	0.266601	0.434274	Uiso ? Si
Si46	1.0	0.042374	0.313082	0.656177	Uiso ? Si

Si47	1.0	0.989350	0.188199	0.757675	Uiso ? Si
Si48	1.0	0.124716	0.300220	0.289118	Uiso ? Si
Si49	1.0	0.142138	0.197538	0.124982	Uiso ? Si
Si50	1.0	0.113837	0.164082	0.908345	Uiso ? Si
Si51	1.0	0.114547	0.010830	0.938677	Uiso ? Si
Si52	1.0	0.154514	0.965406	0.148166	Uiso ? Si
Si53	1.0	0.124680	0.081464	0.283200	Uiso ? Si
Si54	1.0	0.346430	0.307495	0.294072	Uiso ? Si
Si55	1.0	0.298614	0.187176	0.149132	Uiso ? Si
Si56	1.0	0.352647	0.149320	0.940443	Uiso ? Si
Si57	1.0	0.355070	0.996257	0.942752	Uiso ? Si
Si58	1.0	0.309815	0.952622	0.148990	Uiso ? Si
Si59	1.0	0.335463	0.068498	0.291986	Uiso ? Si
Si60	1.0	0.733186	0.309088	0.309995	Uiso ? Si
Si61	1.0	0.703003	0.188500	0.164446	Uiso ? Si
Si62	1.0	0.734666	0.148573	0.947208	Uiso ? Si
Si63	1.0	0.739145	0.993389	0.943272	Uiso ? Si
Si64	1.0	0.697657	0.945416	0.154998	Uiso ? Si
Si65	1.0	0.743889	0.058686	0.286611	Uiso ? Si
Si66	1.0	0.504386	0.295749	0.279559	Uiso ? Si
Si67	1.0	0.543477	0.185358	0.133224	Uiso ? Si
Si68	1.0	0.513392	0.146736	0.918906	Uiso ? Si
Si69	1.0	0.510247	0.991921	0.935635	Uiso ? Si
Si70	1.0	0.542541	0.949203	0.161856	Uiso ? Si
Si71	1.0	0.490608	0.072742	0.261197	Uiso ? Si
Si72	1.0	0.227363	0.465032	0.638268	Uiso ? Si
Si73	1.0	0.213008	0.567744	0.801356	Uiso ? Si
Si74	1.0	0.243004	0.601226	0.019524	Uiso ? Si
Si75	1.0	0.238790	0.753526	0.992976	Uiso ? Si
Si76	1.0	0.202536	0.800808	0.783552	Uiso ? Si
Si77	1.0	0.232292	0.685071	0.649263	Uiso ? Si
Si78	1.0	0.002230	0.460991	0.643984	Uiso ? Si
Si79	1.0	0.055299	0.579416	0.781444	Uiso ? Si
Si80	1.0	0.009055	0.620592	0.995834	Uiso ? Si
Si81	1.0	0.000390	0.773451	0.992666	Uiso ? Si
Si82	1.0	0.046622	0.812720	0.783098	Uiso ? Si
Si83	1.0	0.019781	0.697398	0.634991	Uiso ? Si
Si84	1.0	0.628252	0.449383	0.634446	Uiso ? Si
Si85	1.0	0.658167	0.569213	0.774974	Uiso ? Si
Si86	1.0	0.618200	0.600976	0.992569	Uiso ? Si
Si87	1.0	0.615945	0.755915	0.994570	Uiso ? Si
Si88	1.0	0.657511	0.802217	0.781388	Uiso ? Si
Si89	1.0	0.609799	0.690184	0.644729	Uiso ? Si
Si90	1.0	0.842800	0.461096	0.653092	Uiso ? Si
Si91	1.0	0.814791	0.577989	0.805665	Uiso ? Si
Si92	1.0	0.850145	0.615894	0.017735	Uiso ? Si
Si93	1.0	0.844771	0.770672	0.995342	Uiso ? Si
Si94	1.0	0.812211	0.809720	0.767724	Uiso ? Si
Si95	1.0	0.866789	0.685514	0.667542	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.460479	0.467790	0.687740	Uiso ? Cu



• **mfi-8mr-2co.cif**

#=====

# CRYSTAL DATA

#-----

data\_VESTA\_phase\_1

\_chemical\_name\_common 'C2 O194 Al1 Si95 Cu1'  
\_cell\_length\_a 19.570553  
\_cell\_length\_b 19.816404  
\_cell\_length\_c 13.297324  
\_cell\_angle\_alpha 90.445961  
\_cell\_angle\_beta 91.355186  
\_cell\_angle\_gamma 90.085724  
\_cell\_volume 5155.335631  
\_space\_group\_name\_H-M\_alt 'P 1'  
\_space\_group\_IT\_number 1

loop\_

\_space\_group\_symop\_operation\_xyz  
'x, y, z'

loop\_

\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_occupancy  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z  
\_atom\_site\_adp\_type  
\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv  
\_atom\_site\_type\_symbol  
C1 1.0 0.633964 0.674170 0.624606 Uiso ? C  
C2 1.0 0.464351 0.628079 0.614168 Uiso ? C  
O1 1.0 0.698630 0.561291 0.434524 Uiso ? O  
O2 1.0 0.704594 0.505297 0.609799 Uiso ? O  
O3 1.0 0.662316 0.396092 0.707450 Uiso ? O  
O4 1.0 0.697039 0.300676 0.575859 Uiso ? O  
O5 1.0 0.658850 0.309742 0.379934 Uiso ? O  
O6 1.0 0.666963 0.431557 0.451076 Uiso ? O  
O7 1.0 0.463076 0.554224 0.418171 Uiso ? O  
O8 1.0 0.452620 0.473036 0.584866 Uiso ? O  
O9 1.0 0.481948 0.374297 0.714280 Uiso ? O  
O10 1.0 0.442242 0.282036 0.576752 Uiso ? O  
O11 1.0 0.468499 0.291686 0.382089 Uiso ? O  
O12 1.0 0.513151 0.417842 0.407901 Uiso ? O  
O13 1.0 0.582196 0.523098 0.523574 Uiso ? O  
O14 1.0 0.569307 0.280554 0.521162 Uiso ? O  
O15 1.0 0.740689 0.617554 0.266227 Uiso ? O  
O16 1.0 0.612612 0.567650 0.281651 Uiso ? O  
O17 1.0 0.484306 0.601351 0.234386 Uiso ? O

018	1.0	0.754857	0.392367	0.313991	Uiso ? 0
019	1.0	0.629676	0.412856	0.256538	Uiso ? 0
020	1.0	0.502311	0.365421	0.225702	Uiso ? 0
021	1.0	0.664173	0.192752	0.463289	Uiso ? 0
022	1.0	0.490387	0.176545	0.473477	Uiso ? 0
023	1.0	0.369206	0.629416	0.326564	Uiso ? 0
024	1.0	0.390313	0.394441	0.321642	Uiso ? 0
025	1.0	0.380483	0.456894	0.749889	Uiso ? 0
026	1.0	0.372636	0.294241	0.741052	Uiso ? 0
027	1.0	0.103323	0.573939	0.431692	Uiso ? 0
028	1.0	0.080460	0.505776	0.596703	Uiso ? 0
029	1.0	0.044605	0.388577	0.676494	Uiso ? 0
030	1.0	0.097055	0.272685	0.606932	Uiso ? 0
031	1.0	0.051483	0.312835	0.425994	Uiso ? 0
032	1.0	0.064068	0.446419	0.418809	Uiso ? 0
033	1.0	0.291722	0.565221	0.460690	Uiso ? 0
034	1.0	0.278761	0.504067	0.632807	Uiso ? 0
035	1.0	0.271529	0.379610	0.699994	Uiso ? 0
036	1.0	0.285175	0.268958	0.590230	Uiso ? 0
037	1.0	0.306836	0.306371	0.400752	Uiso ? 0
038	1.0	0.312856	0.431414	0.473166	Uiso ? 0
039	1.0	0.188543	0.477361	0.484529	Uiso ? 0
040	1.0	0.181949	0.287658	0.459910	Uiso ? 0
041	1.0	0.999749	0.593588	0.301741	Uiso ? 0
042	1.0	0.128503	0.611410	0.244076	Uiso ? 0
043	1.0	0.256859	0.565611	0.267752	Uiso ? 0
044	1.0	0.993284	0.382014	0.278609	Uiso ? 0
045	1.0	0.127981	0.366217	0.287947	Uiso ? 0
046	1.0	0.257955	0.409777	0.292569	Uiso ? 0
047	1.0	0.093232	0.186222	0.456138	Uiso ? 0
048	1.0	0.265996	0.182655	0.443449	Uiso ? 0
049	1.0	0.552600	0.818869	0.909230	Uiso ? 0
050	1.0	0.550521	0.872421	0.732247	Uiso ? 0
051	1.0	0.588698	0.983976	0.638439	Uiso ? 0
052	1.0	0.552518	0.080374	0.767932	Uiso ? 0
053	1.0	0.591541	0.070892	0.963287	Uiso ? 0
054	1.0	0.579229	0.949372	0.891628	Uiso ? 0
055	1.0	0.786860	0.828141	0.917014	Uiso ? 0
056	1.0	0.790599	0.907173	0.762666	Uiso ? 0
057	1.0	0.767848	0.006372	0.633593	Uiso ? 0
058	1.0	0.807841	0.099506	0.767637	Uiso ? 0
059	1.0	0.779056	0.082164	0.958973	Uiso ? 0
060	1.0	0.739869	0.953905	0.932539	Uiso ? 0
061	1.0	0.670171	0.861989	0.827079	Uiso ? 0
062	1.0	0.680141	0.100300	0.821682	Uiso ? 0
063	1.0	0.507725	0.763209	0.077502	Uiso ? 0
064	1.0	0.635515	0.813075	0.064239	Uiso ? 0
065	1.0	0.765941	0.786920	0.103122	Uiso ? 0
066	1.0	0.494088	0.990505	0.031522	Uiso ? 0
067	1.0	0.620175	0.966959	0.084066	Uiso ? 0

068	1.0	0.748357	0.007350	0.114652	Uiso ? 0
069	1.0	0.585589	0.188414	0.880908	Uiso ? 0
070	1.0	0.760681	0.202273	0.877561	Uiso ? 0
071	1.0	0.880204	0.756281	0.012600	Uiso ? 0
072	1.0	0.861048	0.981917	0.018639	Uiso ? 0
073	1.0	0.868607	0.921493	0.603880	Uiso ? 0
074	1.0	0.876454	0.086488	0.602388	Uiso ? 0
075	1.0	0.146411	0.806138	0.911156	Uiso ? 0
076	1.0	0.170350	0.874075	0.746087	Uiso ? 0
077	1.0	0.204302	0.990811	0.663901	Uiso ? 0
078	1.0	0.149843	0.105501	0.734696	Uiso ? 0
079	1.0	0.197956	0.066791	0.914634	Uiso ? 0
080	1.0	0.188922	0.932977	0.924821	Uiso ? 0
081	1.0	0.961516	0.815950	0.880973	Uiso ? 0
082	1.0	0.975671	0.876395	0.709365	Uiso ? 0
083	1.0	0.977157	0.001491	0.644588	Uiso ? 0
084	1.0	0.964456	0.112594	0.752657	Uiso ? 0
085	1.0	0.941687	0.073549	0.941180	Uiso ? 0
086	1.0	0.938629	0.948924	0.866880	Uiso ? 0
087	1.0	0.064020	0.905177	0.859574	Uiso ? 0
088	1.0	0.066977	0.091966	0.884145	Uiso ? 0
089	1.0	0.250465	0.786766	0.039612	Uiso ? 0
090	1.0	0.122220	0.768230	0.098972	Uiso ? 0
091	1.0	0.994005	0.814668	0.074732	Uiso ? 0
092	1.0	0.258061	0.000447	0.063535	Uiso ? 0
093	1.0	0.123265	0.013242	0.054443	Uiso ? 0
094	1.0	0.993401	0.970348	0.048410	Uiso ? 0
095	1.0	0.155639	0.193250	0.884327	Uiso ? 0
096	1.0	0.983737	0.197618	0.900839	Uiso ? 0
097	1.0	0.046190	0.068123	0.393397	Uiso ? 0
098	1.0	0.050724	0.008714	0.219009	Uiso ? 0
099	1.0	0.093593	0.896297	0.130506	Uiso ? 0
0100	1.0	0.047135	0.800814	0.255283	Uiso ? 0
0101	1.0	0.077576	0.814485	0.452003	Uiso ? 0
0102	1.0	0.076775	0.937257	0.382361	Uiso ? 0
0103	1.0	0.278107	0.050154	0.441079	Uiso ? 0
0104	1.0	0.291366	0.003831	0.258197	Uiso ? 0
0105	1.0	0.280400	0.886080	0.167215	Uiso ? 0
0106	1.0	0.287833	0.760205	0.229759	Uiso ? 0
0107	1.0	0.286570	0.802226	0.422291	Uiso ? 0
0108	1.0	0.239349	0.926658	0.401253	Uiso ? 0
0109	1.0	0.166961	0.027026	0.323132	Uiso ? 0
0110	1.0	0.171568	0.780878	0.320344	Uiso ? 0
0111	1.0	0.003784	0.121237	0.565254	Uiso ? 0
0112	1.0	0.130298	0.071096	0.546016	Uiso ? 0
0113	1.0	0.252580	0.110892	0.612059	Uiso ? 0
0114	1.0	0.983551	0.900753	0.513425	Uiso ? 0
0115	1.0	0.110199	0.915288	0.576268	Uiso ? 0
0116	1.0	0.239420	0.871981	0.580522	Uiso ? 0
0117	1.0	0.072263	0.695325	0.373061	Uiso ? 0

0118	1.0	0.249853	0.678227	0.375653	Uiso ? 0
0119	1.0	0.373092	0.125816	0.534487	Uiso ? 0
0120	1.0	0.358055	0.900835	0.500134	Uiso ? 0
0121	1.0	0.381080	0.969430	0.123352	Uiso ? 0
0122	1.0	0.377967	0.804661	0.097541	Uiso ? 0
0123	1.0	0.686147	0.063083	0.445175	Uiso ? 0
0124	1.0	0.663816	0.009713	0.263994	Uiso ? 0
0125	1.0	0.704520	0.891545	0.190904	Uiso ? 0
0126	1.0	0.675350	0.765630	0.241613	Uiso ? 0
0127	1.0	0.692241	0.799589	0.437080	Uiso ? 0
0128	1.0	0.679699	0.931165	0.420271	Uiso ? 0
0129	1.0	0.445775	0.059869	0.400903	Uiso ? 0
0130	1.0	0.492399	0.006841	0.229740	Uiso ? 0
0131	1.0	0.484127	0.883759	0.150499	Uiso ? 0
0132	1.0	0.451157	0.775476	0.257242	Uiso ? 0
0133	1.0	0.452105	0.806305	0.452612	Uiso ? 0
0134	1.0	0.457580	0.927209	0.374989	Uiso ? 0
0135	1.0	0.567441	0.005481	0.401157	Uiso ? 0
0136	1.0	0.568704	0.785673	0.357125	Uiso ? 0
0137	1.0	0.749501	0.133609	0.590816	Uiso ? 0
0138	1.0	0.616760	0.111862	0.601841	Uiso ? 0
0139	1.0	0.488120	0.069290	0.592589	Uiso ? 0
0140	1.0	0.741586	0.878665	0.581486	Uiso ? 0
0141	1.0	0.607562	0.863978	0.554743	Uiso ? 0
0142	1.0	0.481712	0.911418	0.571968	Uiso ? 0
0143	1.0	0.649501	0.678393	0.381802	Uiso ? 0
0144	1.0	0.484788	0.683645	0.394237	Uiso ? 0
0145	1.0	0.202128	0.311141	0.948568	Uiso ? 0
0146	1.0	0.199531	0.370661	0.123021	Uiso ? 0
0147	1.0	0.157247	0.483385	0.211977	Uiso ? 0
0148	1.0	0.202786	0.578973	0.087071	Uiso ? 0
0149	1.0	0.167541	0.565033	0.891339	Uiso ? 0
0150	1.0	0.172478	0.442205	0.960510	Uiso ? 0
0151	1.0	0.971211	0.330065	0.902918	Uiso ? 0
0152	1.0	0.957555	0.377252	0.084943	Uiso ? 0
0153	1.0	0.967203	0.495322	0.174065	Uiso ? 0
0154	1.0	0.959609	0.621040	0.112258	Uiso ? 0
0155	1.0	0.964897	0.577618	0.920032	Uiso ? 0
0156	1.0	0.011491	0.453273	0.941382	Uiso ? 0
0157	1.0	0.082298	0.352704	0.021163	Uiso ? 0
0158	1.0	0.077720	0.601501	0.027246	Uiso ? 0
0159	1.0	0.245155	0.259012	0.776528	Uiso ? 0
0160	1.0	0.118268	0.308357	0.795266	Uiso ? 0
0161	1.0	0.995529	0.269307	0.731423	Uiso ? 0
0162	1.0	0.263887	0.482082	0.828730	Uiso ? 0
0163	1.0	0.138046	0.463185	0.767056	Uiso ? 0
0164	1.0	0.009387	0.507075	0.760854	Uiso ? 0
0165	1.0	0.177754	0.684423	0.969201	Uiso ? 0
0166	1.0	0.998460	0.701977	0.966314	Uiso ? 0
0167	1.0	0.876037	0.253442	0.811251	Uiso ? 0

O168	1.0	0.892158	0.478614	0.844670	Uiso ? O
O169	1.0	0.868729	0.410724	0.222617	Uiso ? O
O170	1.0	0.871164	0.577603	0.246767	Uiso ? O
O171	1.0	0.564541	0.318432	0.897778	Uiso ? O
O172	1.0	0.585466	0.373857	0.077343	Uiso ? O
O173	1.0	0.539136	0.487591	0.161188	Uiso ? O
O174	1.0	0.578280	0.608881	0.099853	Uiso ? O
O175	1.0	0.558276	0.582346	0.902363	Uiso ? O
O176	1.0	0.572705	0.450998	0.919875	Uiso ? O
O177	1.0	0.804190	0.320772	0.944185	Uiso ? O
O178	1.0	0.757807	0.373625	0.115646	Uiso ? O
O179	1.0	0.766447	0.497421	0.192174	Uiso ? O
O180	1.0	0.797298	0.607689	0.087747	Uiso ? O
O181	1.0	0.801453	0.575012	0.893761	Uiso ? O
O182	1.0	0.793424	0.453658	0.971631	Uiso ? O
O183	1.0	0.683334	0.375552	0.943043	Uiso ? O
O184	1.0	0.682496	0.594606	0.980187	Uiso ? O
O185	1.0	0.499283	0.246804	0.754102	Uiso ? O
O186	1.0	0.631963	0.267993	0.740629	Uiso ? O
O187	1.0	0.760707	0.307917	0.752796	Uiso ? O
O188	1.0	0.506141	0.503550	0.761634	Uiso ? O
O189	1.0	0.640212	0.518560	0.779914	Uiso ? O
O190	1.0	0.767283	0.469752	0.776382	Uiso ? O
O191	1.0	0.600358	0.701548	0.966005	Uiso ? O
O192	1.0	0.765317	0.698449	0.949911	Uiso ? O
O193	1.0	0.674664	0.711419	0.647867	Uiso ? O
O194	1.0	0.409170	0.638705	0.628291	Uiso ? O
Al1	1.0	0.501017	0.488376	0.481145	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.675837	0.606234	0.338155	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.662266	0.504796	0.503399	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.693790	0.471825	0.719110	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.687993	0.318262	0.694274	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.647457	0.271366	0.485506	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.676223	0.386798	0.350020	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.450229	0.614906	0.343713	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.455185	0.451807	0.699714	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.448887	0.299606	0.696323	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.492240	0.257955	0.487499	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.468762	0.368047	0.336700	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.075903	0.617699	0.336863	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.109076	0.500584	0.483634	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.067831	0.466220	0.700584	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.063648	0.310607	0.701484	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.104996	0.264649	0.486504	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.059600	0.377506	0.352482	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.292812	0.609074	0.358273	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.268208	0.495141	0.512140	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.299289	0.455495	0.726891	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.293766	0.300603	0.701714	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.260206	0.262026	0.474053	Uiso ? Si

Si23	1.0	0.316665	0.385147	0.371503	Uiso ? Si
Si24	1.0	0.573230	0.773658	0.006296	Uiso ? Si
Si25	1.0	0.588833	0.875713	0.841340	Uiso ? Si
Si26	1.0	0.557050	0.908444	0.624017	Uiso ? Si
Si27	1.0	0.561518	0.061479	0.649904	Uiso ? Si
Si28	1.0	0.601934	0.109993	0.857926	Uiso ? Si
Si29	1.0	0.571959	0.994330	0.992874	Uiso ? Si
Si30	1.0	0.799199	0.767579	0.995749	Uiso ? Si
Si31	1.0	0.746461	0.887919	0.859696	Uiso ? Si
Si32	1.0	0.792070	0.928359	0.645359	Uiso ? Si
Si33	1.0	0.800604	0.081667	0.648249	Uiso ? Si
Si34	1.0	0.757153	0.121649	0.856964	Uiso ? Si
Si35	1.0	0.782631	0.006774	0.005101	Uiso ? Si
Si36	1.0	0.174380	0.762016	0.005472	Uiso ? Si
Si37	1.0	0.142931	0.879748	0.859691	Uiso ? Si
Si38	1.0	0.181267	0.913000	0.641098	Uiso ? Si
Si39	1.0	0.184626	0.068817	0.640184	Uiso ? Si
Si40	1.0	0.143715	0.114776	0.855206	Uiso ? Si
Si41	1.0	0.191669	0.002741	0.989590	Uiso ? Si
Si42	1.0	0.958103	0.772356	0.983239	Uiso ? Si
Si43	1.0	0.985258	0.885818	0.829943	Uiso ? Si
Si44	1.0	0.950697	0.925314	0.618167	Uiso ? Si
Si45	1.0	0.955548	0.080613	0.641445	Uiso ? Si
Si46	1.0	0.989145	0.118532	0.869167	Uiso ? Si
Si47	1.0	0.934790	0.994357	0.969360	Uiso ? Si
Si48	1.0	0.068082	0.112651	0.491844	Uiso ? Si
Si49	1.0	0.085698	0.010275	0.330429	Uiso ? Si
Si50	1.0	0.064567	0.972420	0.112033	Uiso ? Si
Si51	1.0	0.064490	0.819810	0.140390	Uiso ? Si
Si52	1.0	0.092303	0.772343	0.350081	Uiso ? Si
Si53	1.0	0.062572	0.892429	0.480698	Uiso ? Si
Si54	1.0	0.292759	0.117649	0.506867	Uiso ? Si
Si55	1.0	0.243317	0.002485	0.355582	Uiso ? Si
Si56	1.0	0.301995	0.964692	0.152394	Uiso ? Si
Si57	1.0	0.299175	0.809128	0.134002	Uiso ? Si
Si58	1.0	0.249372	0.755409	0.336483	Uiso ? Si
Si59	1.0	0.280520	0.875533	0.476053	Uiso ? Si
Si60	1.0	0.678684	0.124450	0.525257	Uiso ? Si
Si61	1.0	0.649262	0.002649	0.382574	Uiso ? Si
Si62	1.0	0.684083	0.968979	0.163347	Uiso ? Si
Si63	1.0	0.695629	0.814683	0.150353	Uiso ? Si
Si64	1.0	0.646708	0.757859	0.353993	Uiso ? Si
Si65	1.0	0.680409	0.869512	0.498981	Uiso ? Si
Si66	1.0	0.449657	0.108225	0.500476	Uiso ? Si
Si67	1.0	0.490937	0.000580	0.351016	Uiso ? Si
Si68	1.0	0.462590	0.962467	0.134677	Uiso ? Si
Si69	1.0	0.455165	0.806801	0.145376	Uiso ? Si
Si70	1.0	0.489040	0.762806	0.364981	Uiso ? Si
Si71	1.0	0.437019	0.885709	0.475161	Uiso ? Si
Si72	1.0	0.180697	0.267148	0.849506	Uiso ? Si

Si73	1.0	0.163612	0.369209	0.012362	Uiso ? Si
Si74	1.0	0.186562	0.407229	0.230098	Uiso ? Si
Si75	1.0	0.186295	0.559920	0.202438	Uiso ? Si
Si76	1.0	0.156484	0.607795	0.993769	Uiso ? Si
Si77	1.0	0.185065	0.487597	0.862260	Uiso ? Si
Si78	1.0	0.956445	0.262597	0.837414	Uiso ? Si
Si79	1.0	0.006260	0.377822	0.988180	Uiso ? Si
Si80	1.0	0.947320	0.416477	0.190895	Uiso ? Si
Si81	1.0	0.949542	0.572192	0.208646	Uiso ? Si
Si82	1.0	0.999777	0.625070	0.006855	Uiso ? Si
Si83	1.0	0.969858	0.504118	0.866646	Uiso ? Si
Si84	1.0	0.570396	0.256619	0.818356	Uiso ? Si
Si85	1.0	0.601287	0.379316	0.959620	Uiso ? Si
Si86	1.0	0.563564	0.410026	0.180995	Uiso ? Si
Si87	1.0	0.552879	0.565369	0.194157	Uiso ? Si
Si88	1.0	0.604337	0.621506	0.987610	Uiso ? Si
Si89	1.0	0.569108	0.512119	0.840766	Uiso ? Si
Si90	1.0	0.799733	0.271150	0.846249	Uiso ? Si
Si91	1.0	0.759379	0.380349	0.994427	Uiso ? Si
Si92	1.0	0.787160	0.418668	0.210444	Uiso ? Si
Si93	1.0	0.794012	0.574733	0.198566	Uiso ? Si
Si94	1.0	0.761741	0.618939	0.977974	Uiso ? Si
Si95	1.0	0.813788	0.495156	0.871347	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.561002	0.613339	0.588710	Uiso ? Cu

• **mfi-8mr-co.cif**

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C1 O193 Al1 Si95 Cu1'
_cell_length_a             19.603857
_cell_length_b             19.828161
_cell_length_c             13.291985
_cell_angle_alpha          90.600075
_cell_angle_beta           91.320602
_cell_angle_gamma          90.162140
_cell_volume                5165.026550
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
```

<u>_atom_site_fract_x</u>	<u>_atom_site_fract_y</u>	<u>_atom_site_fract_z</u>	<u>_atom_site_adp_type</u>	<u>_atom_site_U_iso_or_equiv</u>	<u>_atom_site_type_symbol</u>
C1	1.0	0.577050	0.689754	0.625590	Uiso ? C
O1	1.0	0.697172	0.564824	0.443390	Uiso ? O
O2	1.0	0.705936	0.503799	0.615576	Uiso ? O
O3	1.0	0.661392	0.395162	0.711437	Uiso ? O
O4	1.0	0.698381	0.300996	0.579038	Uiso ? O
O5	1.0	0.661140	0.310664	0.383488	Uiso ? O
O6	1.0	0.667911	0.433493	0.452798	Uiso ? O
O7	1.0	0.473090	0.570125	0.452750	Uiso ? O
O8	1.0	0.454005	0.464150	0.589314	Uiso ? O
O9	1.0	0.480323	0.372467	0.728353	Uiso ? O
O10	1.0	0.443413	0.285061	0.582144	Uiso ? O
O11	1.0	0.468946	0.299720	0.388615	Uiso ? O
O12	1.0	0.507583	0.430379	0.397314	Uiso ? O
O13	1.0	0.583404	0.520921	0.531797	Uiso ? O
O14	1.0	0.570312	0.284744	0.523539	Uiso ? O
O15	1.0	0.743953	0.616990	0.274689	Uiso ? O
O16	1.0	0.617230	0.564003	0.283622	Uiso ? O
O17	1.0	0.485521	0.586895	0.252778	Uiso ? O
O18	1.0	0.755959	0.394109	0.316915	Uiso ? O
O19	1.0	0.629939	0.410384	0.259271	Uiso ? O
O20	1.0	0.501432	0.366278	0.225168	Uiso ? O
O21	1.0	0.663100	0.193997	0.465457	Uiso ? O
O22	1.0	0.490050	0.181788	0.473793	Uiso ? O
O23	1.0	0.371466	0.620949	0.336912	Uiso ? O
O24	1.0	0.386934	0.394935	0.317419	Uiso ? O
O25	1.0	0.380226	0.457852	0.754201	Uiso ? O
O26	1.0	0.371639	0.290347	0.744981	Uiso ? O
O27	1.0	0.105571	0.572647	0.433403	Uiso ? O
O28	1.0	0.077933	0.505425	0.597934	Uiso ? O
O29	1.0	0.043392	0.388349	0.679077	Uiso ? O
O30	1.0	0.096358	0.273021	0.608295	Uiso ? O
O31	1.0	0.051266	0.312660	0.427420	Uiso ? O
O32	1.0	0.062424	0.446356	0.419360	Uiso ? O
O33	1.0	0.285929	0.564269	0.464217	Uiso ? O
O34	1.0	0.278275	0.501955	0.635317	Uiso ? O
O35	1.0	0.272920	0.378273	0.703928	Uiso ? O
O36	1.0	0.285593	0.269143	0.590995	Uiso ? O
O37	1.0	0.306105	0.306253	0.401323	Uiso ? O
O38	1.0	0.312333	0.431814	0.472603	Uiso ? O
O39	1.0	0.186450	0.473250	0.489731	Uiso ? O
O40	1.0	0.181620	0.287962	0.461694	Uiso ? O
O41	1.0	0.001504	0.592250	0.304721	Uiso ? O
O42	1.0	0.129942	0.611867	0.246681	Uiso ? O
O43	1.0	0.257662	0.565158	0.268331	Uiso ? O



044	1.0	0.990934	0.380676	0.281316	Uiso ? 0
045	1.0	0.125293	0.366514	0.286751	Uiso ? 0
046	1.0	0.254878	0.409136	0.294533	Uiso ? 0
047	1.0	0.093095	0.186342	0.457465	Uiso ? 0
048	1.0	0.264876	0.182664	0.444710	Uiso ? 0
049	1.0	0.554678	0.814924	0.901932	Uiso ? 0
050	1.0	0.548576	0.874977	0.729287	Uiso ? 0
051	1.0	0.588608	0.985281	0.633903	Uiso ? 0
052	1.0	0.552026	0.078663	0.767220	Uiso ? 0
053	1.0	0.593870	0.068781	0.961489	Uiso ? 0
054	1.0	0.578344	0.946419	0.893106	Uiso ? 0
055	1.0	0.785098	0.823362	0.906249	Uiso ? 0
056	1.0	0.790356	0.909200	0.760014	Uiso ? 0
057	1.0	0.768809	0.005872	0.627222	Uiso ? 0
058	1.0	0.808035	0.097433	0.764751	Uiso ? 0
059	1.0	0.778483	0.078409	0.955390	Uiso ? 0
060	1.0	0.739854	0.949117	0.933903	Uiso ? 0
061	1.0	0.669571	0.862952	0.819338	Uiso ? 0
062	1.0	0.680405	0.097422	0.817691	Uiso ? 0
063	1.0	0.505421	0.765935	0.071474	Uiso ? 0
064	1.0	0.633804	0.813845	0.062064	Uiso ? 0
065	1.0	0.765209	0.791936	0.097275	Uiso ? 0
066	1.0	0.493022	0.993217	0.028795	Uiso ? 0
067	1.0	0.617825	0.966704	0.085478	Uiso ? 0
068	1.0	0.746774	0.006206	0.113071	Uiso ? 0
069	1.0	0.587367	0.185939	0.880419	Uiso ? 0
070	1.0	0.760397	0.199074	0.876977	Uiso ? 0
071	1.0	0.878341	0.755957	0.008997	Uiso ? 0
072	1.0	0.860342	0.980335	0.019233	Uiso ? 0
073	1.0	0.868519	0.919302	0.600946	Uiso ? 0
074	1.0	0.877240	0.086488	0.599803	Uiso ? 0
075	1.0	0.145043	0.805925	0.910566	Uiso ? 0
076	1.0	0.170633	0.874142	0.746250	Uiso ? 0
077	1.0	0.204716	0.991223	0.665281	Uiso ? 0
078	1.0	0.150727	0.106183	0.735589	Uiso ? 0
079	1.0	0.196506	0.066527	0.915877	Uiso ? 0
080	1.0	0.188406	0.932541	0.925589	Uiso ? 0
081	1.0	0.962866	0.815805	0.882793	Uiso ? 0
082	1.0	0.974450	0.875585	0.709937	Uiso ? 0
083	1.0	0.976237	0.000088	0.642951	Uiso ? 0
084	1.0	0.962597	0.110154	0.753777	Uiso ? 0
085	1.0	0.941584	0.072655	0.943328	Uiso ? 0
086	1.0	0.938528	0.948323	0.867915	Uiso ? 0
087	1.0	0.063924	0.905627	0.858362	Uiso ? 0
088	1.0	0.066160	0.091284	0.883132	Uiso ? 0
089	1.0	0.247723	0.788970	0.040998	Uiso ? 0
090	1.0	0.119494	0.767633	0.097808	Uiso ? 0
091	1.0	0.991118	0.813575	0.078471	Uiso ? 0
092	1.0	0.255984	0.000913	0.065100	Uiso ? 0
093	1.0	0.121452	0.012019	0.054529	Uiso ? 0

094	1.0	0.992001	0.969321	0.050646	Uiso ? 0
095	1.0	0.154334	0.193095	0.886474	Uiso ? 0
096	1.0	0.982849	0.196503	0.900840	Uiso ? 0
097	1.0	0.046595	0.067751	0.395633	Uiso ? 0
098	1.0	0.050662	0.008543	0.220524	Uiso ? 0
099	1.0	0.091637	0.895308	0.132157	Uiso ? 0
0100	1.0	0.047287	0.799170	0.257371	Uiso ? 0
0101	1.0	0.081398	0.814571	0.452664	Uiso ? 0
0102	1.0	0.077015	0.937099	0.383179	Uiso ? 0
0103	1.0	0.278566	0.050433	0.442327	Uiso ? 0
0104	1.0	0.291267	0.005365	0.258976	Uiso ? 0
0105	1.0	0.281039	0.887445	0.168921	Uiso ? 0
0106	1.0	0.289543	0.761003	0.228792	Uiso ? 0
0107	1.0	0.286035	0.803000	0.421535	Uiso ? 0
0108	1.0	0.239054	0.927270	0.400962	Uiso ? 0
0109	1.0	0.166930	0.027474	0.324257	Uiso ? 0
0110	1.0	0.172376	0.778110	0.317596	Uiso ? 0
0111	1.0	0.005572	0.120485	0.568544	Uiso ? 0
0112	1.0	0.132218	0.071953	0.546531	Uiso ? 0
0113	1.0	0.254294	0.110837	0.613895	Uiso ? 0
0114	1.0	0.984530	0.898067	0.513821	Uiso ? 0
0115	1.0	0.110290	0.916335	0.577314	Uiso ? 0
0116	1.0	0.239020	0.872583	0.580183	Uiso ? 0
0117	1.0	0.073430	0.694523	0.376635	Uiso ? 0
0118	1.0	0.253636	0.678438	0.375274	Uiso ? 0
0119	1.0	0.373608	0.127997	0.533053	Uiso ? 0
0120	1.0	0.357334	0.901496	0.500122	Uiso ? 0
0121	1.0	0.379834	0.972652	0.121505	Uiso ? 0
0122	1.0	0.376118	0.806873	0.092276	Uiso ? 0
0123	1.0	0.684069	0.064450	0.444613	Uiso ? 0
0124	1.0	0.663661	0.011037	0.263579	Uiso ? 0
0125	1.0	0.701501	0.891670	0.192122	Uiso ? 0
0126	1.0	0.677033	0.764299	0.237254	Uiso ? 0
0127	1.0	0.690764	0.800207	0.433095	Uiso ? 0
0128	1.0	0.679489	0.932423	0.419690	Uiso ? 0
0129	1.0	0.447773	0.065460	0.397520	Uiso ? 0
0130	1.0	0.491718	0.009518	0.227052	Uiso ? 0
0131	1.0	0.482263	0.886671	0.145711	Uiso ? 0
0132	1.0	0.449555	0.779084	0.251241	Uiso ? 0
0133	1.0	0.453035	0.810347	0.446402	Uiso ? 0
0134	1.0	0.453506	0.932140	0.372367	Uiso ? 0
0135	1.0	0.566472	0.005046	0.398906	Uiso ? 0
0136	1.0	0.568964	0.788571	0.347823	Uiso ? 0
0137	1.0	0.750310	0.133619	0.588818	Uiso ? 0
0138	1.0	0.617559	0.113383	0.603998	Uiso ? 0
0139	1.0	0.488951	0.072480	0.589754	Uiso ? 0
0140	1.0	0.740811	0.877848	0.579226	Uiso ? 0
0141	1.0	0.606590	0.864653	0.551886	Uiso ? 0
0142	1.0	0.481423	0.914047	0.568237	Uiso ? 0
0143	1.0	0.646316	0.678924	0.377613	Uiso ? 0

0144	1.0	0.485100	0.688703	0.386336	Uiso ? 0
0145	1.0	0.201819	0.311447	0.948361	Uiso ? 0
0146	1.0	0.198202	0.370811	0.123193	Uiso ? 0
0147	1.0	0.156759	0.483891	0.212507	Uiso ? 0
0148	1.0	0.202999	0.579509	0.088198	Uiso ? 0
0149	1.0	0.166921	0.565040	0.892737	Uiso ? 0
0150	1.0	0.170472	0.442207	0.961173	Uiso ? 0
0151	1.0	0.969969	0.329027	0.904154	Uiso ? 0
0152	1.0	0.957830	0.376083	0.086707	Uiso ? 0
0153	1.0	0.968697	0.494319	0.176161	Uiso ? 0
0154	1.0	0.960639	0.620570	0.116202	Uiso ? 0
0155	1.0	0.965043	0.577134	0.923880	Uiso ? 0
0156	1.0	0.010469	0.452308	0.942891	Uiso ? 0
0157	1.0	0.081615	0.351523	0.020755	Uiso ? 0
0158	1.0	0.078072	0.602429	0.029567	Uiso ? 0
0159	1.0	0.243052	0.257567	0.776044	Uiso ? 0
0160	1.0	0.116850	0.307793	0.796947	Uiso ? 0
0161	1.0	0.994426	0.268685	0.732180	Uiso ? 0
0162	1.0	0.262913	0.481434	0.831194	Uiso ? 0
0163	1.0	0.137435	0.463609	0.767275	Uiso ? 0
0164	1.0	0.008818	0.507092	0.763588	Uiso ? 0
0165	1.0	0.178011	0.684726	0.970088	Uiso ? 0
0166	1.0	0.997472	0.701679	0.968913	Uiso ? 0
0167	1.0	0.875068	0.252339	0.812697	Uiso ? 0
0168	1.0	0.891397	0.479801	0.847076	Uiso ? 0
0169	1.0	0.868324	0.411230	0.221880	Uiso ? 0
0170	1.0	0.872934	0.575787	0.250687	Uiso ? 0
0171	1.0	0.566224	0.315039	0.900411	Uiso ? 0
0172	1.0	0.587443	0.369053	0.079737	Uiso ? 0
0173	1.0	0.545211	0.485532	0.156700	Uiso ? 0
0174	1.0	0.572240	0.611831	0.109269	Uiso ? 0
0175	1.0	0.558184	0.578686	0.912332	Uiso ? 0
0176	1.0	0.571400	0.447393	0.923090	Uiso ? 0
0177	1.0	0.802878	0.316626	0.949382	Uiso ? 0
0178	1.0	0.756334	0.372839	0.119118	Uiso ? 0
0179	1.0	0.766658	0.497878	0.193704	Uiso ? 0
0180	1.0	0.798449	0.609230	0.093957	Uiso ? 0
0181	1.0	0.797544	0.572516	0.901108	Uiso ? 0
0182	1.0	0.795934	0.450137	0.975872	Uiso ? 0
0183	1.0	0.684002	0.375124	0.944503	Uiso ? 0
0184	1.0	0.680756	0.593273	0.996363	Uiso ? 0
0185	1.0	0.498964	0.244244	0.757311	Uiso ? 0
0186	1.0	0.631185	0.266542	0.740036	Uiso ? 0
0187	1.0	0.759608	0.307157	0.757639	Uiso ? 0
0188	1.0	0.506878	0.502387	0.765944	Uiso ? 0
0189	1.0	0.641024	0.516871	0.788052	Uiso ? 0
0190	1.0	0.766905	0.467131	0.781777	Uiso ? 0
0191	1.0	0.599615	0.699334	0.970575	Uiso ? 0
0192	1.0	0.762364	0.696402	0.953809	Uiso ? 0
0193	1.0	0.598029	0.729867	0.678238	Uiso ? 0

Al1	1.0	0.501869	0.489506	0.490855	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.677128	0.606224	0.342506	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.663176	0.505439	0.509851	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.693533	0.470705	0.724643	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.687744	0.317765	0.697536	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.648301	0.272761	0.488612	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.677643	0.387617	0.352969	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.452634	0.615124	0.355914	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.455511	0.449828	0.706889	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.448386	0.298301	0.703111	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.492788	0.262963	0.491291	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.466413	0.373208	0.334751	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.077364	0.616955	0.339675	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.107967	0.499298	0.485745	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.066615	0.466132	0.702386	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.062453	0.310357	0.703056	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.104709	0.264788	0.487937	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.057934	0.377112	0.353560	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.292450	0.606890	0.361723	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.265803	0.493086	0.515133	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.299423	0.454630	0.730276	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.293551	0.298988	0.703868	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.259691	0.262111	0.475221	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.314733	0.384910	0.371130	Uiso ? Si
Si24	1.0	0.572731	0.773077	0.003137	Uiso ? Si
Si25	1.0	0.588531	0.874686	0.837172	Uiso ? Si
Si26	1.0	0.556427	0.909911	0.620663	Uiso ? Si
Si27	1.0	0.561463	0.062464	0.648261	Uiso ? Si
Si28	1.0	0.602867	0.107709	0.856043	Uiso ? Si
Si29	1.0	0.571433	0.993428	0.992222	Uiso ? Si
Si30	1.0	0.797474	0.766990	0.991633	Uiso ? Si
Si31	1.0	0.745986	0.886207	0.854959	Uiso ? Si
Si32	1.0	0.791976	0.927855	0.641657	Uiso ? Si
Si33	1.0	0.801234	0.081047	0.644750	Uiso ? Si
Si34	1.0	0.757129	0.118708	0.854187	Uiso ? Si
Si35	1.0	0.781828	0.003962	0.004122	Uiso ? Si
Si36	1.0	0.172655	0.762419	0.005573	Uiso ? Si
Si37	1.0	0.142488	0.879630	0.859546	Uiso ? Si
Si38	1.0	0.181398	0.913564	0.641747	Uiso ? Si
Si39	1.0	0.185877	0.069313	0.641409	Uiso ? Si
Si40	1.0	0.142932	0.114679	0.856056	Uiso ? Si
Si41	1.0	0.190164	0.002412	0.990369	Uiso ? Si
Si42	1.0	0.956946	0.772014	0.984395	Uiso ? Si
Si43	1.0	0.985181	0.885530	0.830347	Uiso ? Si
Si44	1.0	0.950367	0.923571	0.617330	Uiso ? Si
Si45	1.0	0.955531	0.079386	0.641427	Uiso ? Si
Si46	1.0	0.988210	0.117304	0.869745	Uiso ? Si
Si47	1.0	0.934132	0.993457	0.970796	Uiso ? Si
Si48	1.0	0.069096	0.112581	0.493696	Uiso ? Si
Si49	1.0	0.085874	0.010185	0.331783	Uiso ? Si

Si50	1.0	0.063306	0.971540	0.113526	Uiso ? Si
Si51	1.0	0.062492	0.818821	0.141941	Uiso ? Si
Si52	1.0	0.093728	0.771121	0.350943	Uiso ? Si
Si53	1.0	0.063707	0.891960	0.481372	Uiso ? Si
Si54	1.0	0.293246	0.118257	0.507693	Uiso ? Si
Si55	1.0	0.243278	0.003279	0.356378	Uiso ? Si
Si56	1.0	0.301395	0.966245	0.152892	Uiso ? Si
Si57	1.0	0.298435	0.810713	0.133198	Uiso ? Si
Si58	1.0	0.250704	0.755211	0.335229	Uiso ? Si
Si59	1.0	0.279988	0.876201	0.475674	Uiso ? Si
Si60	1.0	0.678506	0.125430	0.525734	Uiso ? Si
Si61	1.0	0.648367	0.003421	0.381851	Uiso ? Si
Si62	1.0	0.682418	0.969075	0.163245	Uiso ? Si
Si63	1.0	0.694512	0.815651	0.147266	Uiso ? Si
Si64	1.0	0.646208	0.758387	0.348830	Uiso ? Si
Si65	1.0	0.679562	0.869811	0.496438	Uiso ? Si
Si66	1.0	0.450492	0.112412	0.498793	Uiso ? Si
Si67	1.0	0.490116	0.003901	0.348419	Uiso ? Si
Si68	1.0	0.461245	0.965547	0.131891	Uiso ? Si
Si69	1.0	0.453396	0.809905	0.139124	Uiso ? Si
Si70	1.0	0.489067	0.767543	0.357478	Uiso ? Si
Si71	1.0	0.435998	0.888890	0.472006	Uiso ? Si
Si72	1.0	0.179438	0.266648	0.850272	Uiso ? Si
Si73	1.0	0.162591	0.369002	0.012328	Uiso ? Si
Si74	1.0	0.184489	0.407268	0.230215	Uiso ? Si
Si75	1.0	0.186797	0.560052	0.203473	Uiso ? Si
Si76	1.0	0.156529	0.608235	0.995119	Uiso ? Si
Si77	1.0	0.184028	0.487560	0.863307	Uiso ? Si
Si78	1.0	0.955408	0.261575	0.838246	Uiso ? Si
Si79	1.0	0.005595	0.376801	0.989046	Uiso ? Si
Si80	1.0	0.947104	0.415822	0.192157	Uiso ? Si
Si81	1.0	0.951031	0.571022	0.211757	Uiso ? Si
Si82	1.0	0.999929	0.625095	0.010071	Uiso ? Si
Si83	1.0	0.969249	0.503960	0.869344	Uiso ? Si
Si84	1.0	0.570881	0.254203	0.819405	Uiso ? Si
Si85	1.0	0.602032	0.376601	0.961731	Uiso ? Si
Si86	1.0	0.565398	0.407586	0.181422	Uiso ? Si
Si87	1.0	0.554923	0.561347	0.200503	Uiso ? Si
Si88	1.0	0.602265	0.620047	0.997363	Uiso ? Si
Si89	1.0	0.569146	0.510083	0.846586	Uiso ? Si
Si90	1.0	0.798888	0.268869	0.849084	Uiso ? Si
Si91	1.0	0.759426	0.377975	0.997698	Uiso ? Si
Si92	1.0	0.786954	0.419107	0.211878	Uiso ? Si
Si93	1.0	0.795599	0.574608	0.203589	Uiso ? Si
Si94	1.0	0.759613	0.617649	0.985818	Uiso ? Si
Si95	1.0	0.813069	0.493599	0.876253	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.548071	0.618957	0.544361	Uiso ? Cu

- **mfi-8mr.cif**

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'O192 Al1 Si95 Cu1'
_cell_length_a             19.575855
_cell_length_b             19.796135
_cell_length_c             13.305225
_cell_angle_alpha         90.399727
_cell_angle_beta          91.281281
_cell_angle_gamma         90.066963
_cell_volume               5154.705223
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
01      1.0  0.702034  0.558745  0.428225  Uiso ? O
02      1.0  0.701621  0.507335  0.609231  Uiso ? O
03      1.0  0.662457  0.396173  0.705431  Uiso ? O
04      1.0  0.696779  0.298809  0.577235  Uiso ? O
05      1.0  0.658726  0.309444  0.381448  Uiso ? O
06      1.0  0.666279  0.431128  0.453563  Uiso ? O
07      1.0  0.459075  0.552802  0.416768  Uiso ? O
08      1.0  0.455598  0.472542  0.587703  Uiso ? O
09      1.0  0.481412  0.372588  0.715475  Uiso ? O
010     1.0  0.441971  0.279821  0.578734  Uiso ? O
011     1.0  0.467927  0.292228  0.384478  Uiso ? O
012     1.0  0.512797  0.418751  0.409443  Uiso ? O
013     1.0  0.582488  0.529467  0.512396  Uiso ? O
014     1.0  0.569024  0.279301  0.522123  Uiso ? O
015     1.0  0.740300  0.619427  0.260655  Uiso ? O
016     1.0  0.611858  0.568916  0.280528  Uiso ? O
017     1.0  0.482518  0.600457  0.234076  Uiso ? O
018     1.0  0.754169  0.392580  0.314841  Uiso ? O
019     1.0  0.629118  0.413508  0.259064  Uiso ? O

```

020	1.0	0.502049	0.365521	0.227967	Uiso ? 0
021	1.0	0.663930	0.191664	0.463563	Uiso ? 0
022	1.0	0.489750	0.175709	0.472507	Uiso ? 0
023	1.0	0.366948	0.631801	0.327030	Uiso ? 0
024	1.0	0.389985	0.394779	0.322760	Uiso ? 0
025	1.0	0.380538	0.455852	0.749941	Uiso ? 0
026	1.0	0.371859	0.292653	0.742230	Uiso ? 0
027	1.0	0.103903	0.574071	0.432471	Uiso ? 0
028	1.0	0.079383	0.506361	0.597663	Uiso ? 0
029	1.0	0.043656	0.389363	0.678405	Uiso ? 0
030	1.0	0.096708	0.273628	0.608330	Uiso ? 0
031	1.0	0.051117	0.313043	0.427292	Uiso ? 0
032	1.0	0.063752	0.446707	0.419876	Uiso ? 0
033	1.0	0.290533	0.565375	0.461138	Uiso ? 0
034	1.0	0.278643	0.503962	0.633811	Uiso ? 0
035	1.0	0.271568	0.379019	0.699405	Uiso ? 0
036	1.0	0.284802	0.267959	0.590899	Uiso ? 0
037	1.0	0.306390	0.306502	0.401701	Uiso ? 0
038	1.0	0.312437	0.431679	0.473762	Uiso ? 0
039	1.0	0.187989	0.477040	0.486643	Uiso ? 0
040	1.0	0.181595	0.287728	0.461058	Uiso ? 0
041	1.0	0.999424	0.592830	0.304246	Uiso ? 0
042	1.0	0.127534	0.611473	0.244247	Uiso ? 0
043	1.0	0.255986	0.566039	0.268194	Uiso ? 0
044	1.0	0.992991	0.382242	0.279915	Uiso ? 0
045	1.0	0.127644	0.366237	0.289089	Uiso ? 0
046	1.0	0.257592	0.409832	0.293143	Uiso ? 0
047	1.0	0.092813	0.186445	0.458269	Uiso ? 0
048	1.0	0.265531	0.182515	0.443541	Uiso ? 0
049	1.0	0.552654	0.820279	0.913417	Uiso ? 0
050	1.0	0.550661	0.872840	0.735529	Uiso ? 0
051	1.0	0.587309	0.984031	0.639923	Uiso ? 0
052	1.0	0.552481	0.080629	0.770412	Uiso ? 0
053	1.0	0.590314	0.071381	0.966351	Uiso ? 0
054	1.0	0.580293	0.950256	0.893710	Uiso ? 0
055	1.0	0.787093	0.828591	0.920594	Uiso ? 0
056	1.0	0.790828	0.906760	0.765067	Uiso ? 0
057	1.0	0.767071	0.006260	0.636592	Uiso ? 0
058	1.0	0.807254	0.099532	0.769959	Uiso ? 0
059	1.0	0.779344	0.082487	0.961695	Uiso ? 0
060	1.0	0.740299	0.954343	0.934661	Uiso ? 0
061	1.0	0.670472	0.861982	0.830224	Uiso ? 0
062	1.0	0.679853	0.099920	0.825318	Uiso ? 0
063	1.0	0.507223	0.762113	0.078984	Uiso ? 0
064	1.0	0.634714	0.812260	0.069097	Uiso ? 0
065	1.0	0.765577	0.785178	0.105247	Uiso ? 0
066	1.0	0.494483	0.988650	0.034385	Uiso ? 0
067	1.0	0.620767	0.966952	0.086407	Uiso ? 0
068	1.0	0.748858	0.007105	0.117146	Uiso ? 0
069	1.0	0.585744	0.188852	0.883440	Uiso ? 0

070	1.0	0.760326	0.202440	0.879680	Uiso ? 0
071	1.0	0.880353	0.755973	0.014830	Uiso ? 0
072	1.0	0.861423	0.981964	0.021068	Uiso ? 0
073	1.0	0.867882	0.921711	0.605313	Uiso ? 0
074	1.0	0.875659	0.086447	0.604578	Uiso ? 0
075	1.0	0.145819	0.806356	0.912640	Uiso ? 0
076	1.0	0.169924	0.873749	0.746985	Uiso ? 0
077	1.0	0.203607	0.990596	0.664602	Uiso ? 0
078	1.0	0.149566	0.105453	0.735827	Uiso ? 0
079	1.0	0.197767	0.067211	0.915851	Uiso ? 0
080	1.0	0.188153	0.933321	0.925131	Uiso ? 0
081	1.0	0.960932	0.815650	0.881886	Uiso ? 0
082	1.0	0.974797	0.876292	0.710535	Uiso ? 0
083	1.0	0.976485	0.001610	0.646548	Uiso ? 0
084	1.0	0.964213	0.112968	0.753891	Uiso ? 0
085	1.0	0.941335	0.073614	0.942234	Uiso ? 0
086	1.0	0.938177	0.948785	0.868521	Uiso ? 0
087	1.0	0.063414	0.905082	0.859995	Uiso ? 0
088	1.0	0.066622	0.091636	0.885188	Uiso ? 0
089	1.0	0.250085	0.786806	0.040457	Uiso ? 0
090	1.0	0.122026	0.768154	0.100446	Uiso ? 0
091	1.0	0.994071	0.815075	0.075057	Uiso ? 0
092	1.0	0.258748	0.999757	0.063014	Uiso ? 0
093	1.0	0.123982	0.013435	0.056680	Uiso ? 0
094	1.0	0.994010	0.970695	0.049108	Uiso ? 0
095	1.0	0.154528	0.193479	0.885114	Uiso ? 0
096	1.0	0.983593	0.197721	0.902012	Uiso ? 0
097	1.0	0.045711	0.068512	0.394430	Uiso ? 0
098	1.0	0.050426	0.008845	0.220268	Uiso ? 0
099	1.0	0.093588	0.896362	0.131970	Uiso ? 0
0100	1.0	0.046034	0.800820	0.255967	Uiso ? 0
0101	1.0	0.075701	0.814400	0.452981	Uiso ? 0
0102	1.0	0.076237	0.937415	0.383767	Uiso ? 0
0103	1.0	0.277859	0.049947	0.441534	Uiso ? 0
0104	1.0	0.290396	0.004033	0.258214	Uiso ? 0
0105	1.0	0.280107	0.885779	0.168482	Uiso ? 0
0106	1.0	0.286226	0.759681	0.230817	Uiso ? 0
0107	1.0	0.285854	0.801871	0.422951	Uiso ? 0
0108	1.0	0.239391	0.926497	0.401745	Uiso ? 0
0109	1.0	0.166456	0.027094	0.324545	Uiso ? 0
0110	1.0	0.170281	0.782102	0.321851	Uiso ? 0
0111	1.0	0.002740	0.121274	0.566122	Uiso ? 0
0112	1.0	0.129206	0.070829	0.547495	Uiso ? 0
0113	1.0	0.251734	0.110750	0.612189	Uiso ? 0
0114	1.0	0.982719	0.901384	0.514737	Uiso ? 0
0115	1.0	0.109523	0.914776	0.577396	Uiso ? 0
0116	1.0	0.238796	0.871830	0.581105	Uiso ? 0
0117	1.0	0.071647	0.695322	0.373733	Uiso ? 0
0118	1.0	0.247164	0.678365	0.376786	Uiso ? 0
0119	1.0	0.372456	0.125554	0.535101	Uiso ? 0



0120	1.0	0.357823	0.899750	0.500981	Uiso ? 0
0121	1.0	0.381202	0.968682	0.125596	Uiso ? 0
0122	1.0	0.377441	0.803346	0.100241	Uiso ? 0
0123	1.0	0.686345	0.061633	0.448344	Uiso ? 0
0124	1.0	0.664310	0.008943	0.266533	Uiso ? 0
0125	1.0	0.705160	0.890903	0.192740	Uiso ? 0
0126	1.0	0.676444	0.765115	0.245663	Uiso ? 0
0127	1.0	0.691840	0.798029	0.441670	Uiso ? 0
0128	1.0	0.679569	0.929526	0.421725	Uiso ? 0
0129	1.0	0.445501	0.057811	0.404074	Uiso ? 0
0130	1.0	0.492410	0.005517	0.232441	Uiso ? 0
0131	1.0	0.483363	0.882187	0.154687	Uiso ? 0
0132	1.0	0.451388	0.772279	0.258747	Uiso ? 0
0133	1.0	0.451510	0.804382	0.454071	Uiso ? 0
0134	1.0	0.458772	0.925230	0.377574	Uiso ? 0
0135	1.0	0.567705	0.004632	0.403358	Uiso ? 0
0136	1.0	0.568844	0.783422	0.360331	Uiso ? 0
0137	1.0	0.748784	0.133468	0.593036	Uiso ? 0
0138	1.0	0.616169	0.111812	0.603475	Uiso ? 0
0139	1.0	0.487335	0.070069	0.595555	Uiso ? 0
0140	1.0	0.741002	0.878429	0.584544	Uiso ? 0
0141	1.0	0.606953	0.863870	0.557123	Uiso ? 0
0142	1.0	0.480923	0.909423	0.574892	Uiso ? 0
0143	1.0	0.649077	0.676296	0.383672	Uiso ? 0
0144	1.0	0.486247	0.680907	0.395398	Uiso ? 0
0145	1.0	0.201540	0.311190	0.949414	Uiso ? 0
0146	1.0	0.198889	0.370808	0.123667	Uiso ? 0
0147	1.0	0.156711	0.483406	0.212887	Uiso ? 0
0148	1.0	0.202381	0.578958	0.087628	Uiso ? 0
0149	1.0	0.168952	0.565217	0.891449	Uiso ? 0
0150	1.0	0.171518	0.442338	0.960942	Uiso ? 0
0151	1.0	0.970406	0.330046	0.904334	Uiso ? 0
0152	1.0	0.957026	0.377162	0.086435	Uiso ? 0
0153	1.0	0.966831	0.495454	0.174926	Uiso ? 0
0154	1.0	0.961150	0.621775	0.114853	Uiso ? 0
0155	1.0	0.963214	0.577546	0.922720	Uiso ? 0
0156	1.0	0.010640	0.453287	0.942614	Uiso ? 0
0157	1.0	0.081647	0.352673	0.022198	Uiso ? 0
0158	1.0	0.077622	0.600450	0.025835	Uiso ? 0
0159	1.0	0.244086	0.258820	0.777006	Uiso ? 0
0160	1.0	0.117619	0.309066	0.796600	Uiso ? 0
0161	1.0	0.995132	0.269635	0.732680	Uiso ? 0
0162	1.0	0.263892	0.480543	0.829341	Uiso ? 0
0163	1.0	0.137763	0.463857	0.767382	Uiso ? 0
0164	1.0	0.009192	0.508178	0.763018	Uiso ? 0
0165	1.0	0.177365	0.684522	0.970027	Uiso ? 0
0166	1.0	0.998673	0.701934	0.967481	Uiso ? 0
0167	1.0	0.875672	0.253025	0.812063	Uiso ? 0
0168	1.0	0.891551	0.478453	0.845534	Uiso ? 0
0169	1.0	0.868387	0.411075	0.224293	Uiso ? 0

O170	1.0	0.871145	0.578341	0.247358	Uiso ? O
O171	1.0	0.562790	0.318967	0.899426	Uiso ? O
O172	1.0	0.585940	0.372229	0.080476	Uiso ? O
O173	1.0	0.539090	0.487254	0.161528	Uiso ? O
O174	1.0	0.576394	0.610018	0.100234	Uiso ? O
O175	1.0	0.559067	0.582170	0.903941	Uiso ? O
O176	1.0	0.574547	0.451608	0.926178	Uiso ? O
O177	1.0	0.804911	0.321066	0.944894	Uiso ? O
O178	1.0	0.758100	0.374336	0.116087	Uiso ? O
O179	1.0	0.766355	0.497926	0.193377	Uiso ? O
O180	1.0	0.800312	0.605912	0.084845	Uiso ? O
O181	1.0	0.799435	0.574807	0.890571	Uiso ? O
O182	1.0	0.790658	0.453930	0.969153	Uiso ? O
O183	1.0	0.682855	0.372209	0.944595	Uiso ? O
O184	1.0	0.682781	0.595061	0.985070	Uiso ? O
O185	1.0	0.498669	0.245498	0.756632	Uiso ? O
O186	1.0	0.631042	0.268689	0.742614	Uiso ? O
O187	1.0	0.760108	0.307637	0.754051	Uiso ? O
O188	1.0	0.506735	0.500185	0.767393	Uiso ? O
O189	1.0	0.641562	0.516797	0.784395	Uiso ? O
O190	1.0	0.768194	0.469362	0.771967	Uiso ? O
O191	1.0	0.600963	0.702046	0.967103	Uiso ? O
O192	1.0	0.765849	0.698253	0.950423	Uiso ? O
Al1	1.0	0.500991	0.489618	0.482778	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.677471	0.605064	0.334443	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.662160	0.506163	0.501065	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.693415	0.472185	0.718027	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.687549	0.318010	0.695094	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.647216	0.270364	0.486536	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.675750	0.386793	0.352064	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.446689	0.613184	0.341820	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.456091	0.450894	0.702124	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.448319	0.298079	0.698044	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.491857	0.257130	0.488694	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.468465	0.368632	0.338956	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.075591	0.617587	0.337969	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.108675	0.500708	0.485026	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.067184	0.467051	0.702019	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.063062	0.311320	0.702910	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.104638	0.265010	0.488074	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.059278	0.377718	0.353668	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.290606	0.609594	0.359338	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.267660	0.495128	0.513428	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.299555	0.454783	0.727177	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.293314	0.299844	0.702209	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.259800	0.261880	0.474793	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.316255	0.385328	0.372277	Uiso ? Si
Si24	1.0	0.573145	0.773479	0.008635	Uiso ? Si
Si25	1.0	0.589209	0.876195	0.844192	Uiso ? Si
Si26	1.0	0.556406	0.908095	0.626777	Uiso ? Si

Si27	1.0	0.560829	0.061797	0.652314	Uiso ? Si
Si28	1.0	0.601525	0.110225	0.860788	Uiso ? Si
Si29	1.0	0.572216	0.994294	0.995565	Uiso ? Si
Si30	1.0	0.799354	0.767040	0.997657	Uiso ? Si
Si31	1.0	0.746704	0.888038	0.862416	Uiso ? Si
Si32	1.0	0.791617	0.928256	0.647905	Uiso ? Si
Si33	1.0	0.799884	0.081651	0.650745	Uiso ? Si
Si34	1.0	0.756851	0.121719	0.859676	Uiso ? Si
Si35	1.0	0.783052	0.006932	0.007514	Uiso ? Si
Si36	1.0	0.173955	0.762051	0.006580	Uiso ? Si
Si37	1.0	0.142340	0.879811	0.860457	Uiso ? Si
Si38	1.0	0.180625	0.912723	0.641945	Uiso ? Si
Si39	1.0	0.183913	0.068715	0.641027	Uiso ? Si
Si40	1.0	0.143269	0.114851	0.856221	Uiso ? Si
Si41	1.0	0.191762	0.002846	0.990403	Uiso ? Si
Si42	1.0	0.958030	0.772230	0.984385	Uiso ? Si
Si43	1.0	0.984638	0.885665	0.830984	Uiso ? Si
Si44	1.0	0.949928	0.925522	0.619674	Uiso ? Si
Si45	1.0	0.954830	0.080796	0.643009	Uiso ? Si
Si46	1.0	0.988899	0.118604	0.870308	Uiso ? Si
Si47	1.0	0.934875	0.994385	0.970827	Uiso ? Si
Si48	1.0	0.067317	0.112768	0.493200	Uiso ? Si
Si49	1.0	0.085192	0.010492	0.331700	Uiso ? Si
Si50	1.0	0.064788	0.972654	0.113416	Uiso ? Si
Si51	1.0	0.064178	0.819891	0.141363	Uiso ? Si
Si52	1.0	0.090977	0.772613	0.351045	Uiso ? Si
Si53	1.0	0.061642	0.892539	0.481975	Uiso ? Si
Si54	1.0	0.292213	0.117547	0.507258	Uiso ? Si
Si55	1.0	0.242868	0.002478	0.356171	Uiso ? Si
Si56	1.0	0.301806	0.964419	0.153098	Uiso ? Si
Si57	1.0	0.298362	0.808672	0.135306	Uiso ? Si
Si58	1.0	0.247696	0.755662	0.337543	Uiso ? Si
Si59	1.0	0.280057	0.875223	0.476833	Uiso ? Si
Si60	1.0	0.678323	0.123837	0.527012	Uiso ? Si
Si61	1.0	0.649535	0.001580	0.384965	Uiso ? Si
Si62	1.0	0.684615	0.968552	0.165608	Uiso ? Si
Si63	1.0	0.695888	0.813854	0.153052	Uiso ? Si
Si64	1.0	0.647425	0.757095	0.357265	Uiso ? Si
Si65	1.0	0.680040	0.868800	0.502220	Uiso ? Si
Si66	1.0	0.449155	0.107714	0.501995	Uiso ? Si
Si67	1.0	0.491237	0.999184	0.353679	Uiso ? Si
Si68	1.0	0.462582	0.961158	0.137522	Uiso ? Si
Si69	1.0	0.454662	0.805194	0.147212	Uiso ? Si
Si70	1.0	0.488958	0.761859	0.366568	Uiso ? Si
Si71	1.0	0.436856	0.884191	0.477519	Uiso ? Si
Si72	1.0	0.179912	0.267387	0.850347	Uiso ? Si
Si73	1.0	0.162917	0.369305	0.013120	Uiso ? Si
Si74	1.0	0.186166	0.407184	0.230898	Uiso ? Si
Si75	1.0	0.185478	0.560006	0.202776	Uiso ? Si
Si76	1.0	0.156575	0.607567	0.993710	Uiso ? Si

Si77	1.0	0.185174	0.487374	0.862508	Uiso ? Si
Si78	1.0	0.955945	0.262638	0.838557	Uiso ? Si
Si79	1.0	0.005567	0.377758	0.989408	Uiso ? Si
Si80	1.0	0.946954	0.416538	0.192220	Uiso ? Si
Si81	1.0	0.949800	0.572353	0.210217	Uiso ? Si
Si82	1.0	0.999745	0.624927	0.008063	Uiso ? Si
Si83	1.0	0.968939	0.504335	0.868256	Uiso ? Si
Si84	1.0	0.569632	0.256878	0.820508	Uiso ? Si
Si85	1.0	0.601088	0.378477	0.962463	Uiso ? Si
Si86	1.0	0.563505	0.409589	0.182862	Uiso ? Si
Si87	1.0	0.551820	0.565271	0.193310	Uiso ? Si
Si88	1.0	0.604403	0.621844	0.988553	Uiso ? Si
Si89	1.0	0.570058	0.511287	0.843992	Uiso ? Si
Si90	1.0	0.799466	0.271157	0.847365	Uiso ? Si
Si91	1.0	0.758897	0.380011	0.994668	Uiso ? Si
Si92	1.0	0.786842	0.418908	0.211533	Uiso ? Si
Si93	1.0	0.794928	0.574940	0.196521	Uiso ? Si
Si94	1.0	0.761961	0.618459	0.977191	Uiso ? Si
Si95	1.0	0.812547	0.494854	0.868911	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.561776	0.627008	0.478275	Uiso ? Cu

- **mor-12mr-2co.cif**

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C2 O50 Al1 Si23 Cu1'
_cell_length_a              13.470403
_cell_length_b              13.388365
_cell_length_c              7.371627
_cell_angle_alpha           89.346321
_cell_angle_beta            90.364021
_cell_angle_gamma           84.049538
_cell_volume                 1322.161192
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_adp_type

```

\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv

\_atom\_site\_type\_symbol

C1	1.0	0.752628	0.631021	0.952272	Uiso ? C
C2	1.0	0.726269	0.550768	0.521382	Uiso ? C
O1	1.0	0.157719	0.189654	0.572406	Uiso ? O
O2	1.0	0.583533	0.791940	0.014102	Uiso ? O
O3	1.0	0.601894	0.756011	0.588558	Uiso ? O
O4	1.0	0.152918	0.236329	0.086958	Uiso ? O
O5	1.0	0.279872	0.257470	0.816540	Uiso ? O
O6	1.0	0.472261	0.785394	0.312098	Uiso ? O
O7	1.0	0.153684	0.068443	0.287778	Uiso ? O
O8	1.0	0.655896	0.912841	0.780195	Uiso ? O
O9	1.0	0.347880	0.203886	0.499147	Uiso ? O
O10	1.0	0.403297	0.734078	0.988977	Uiso ? O
O11	1.0	0.191488	0.987623	0.610910	Uiso ? O
O12	1.0	0.581210	0.986816	0.089039	Uiso ? O
O13	1.0	0.413213	0.814772	0.654303	Uiso ? O
O14	1.0	0.348370	0.202838	0.138003	Uiso ? O
O15	1.0	0.602284	0.934859	0.437333	Uiso ? O
O16	1.0	0.159510	0.060189	0.933657	Uiso ? O
O17	1.0	0.218349	0.367974	0.524937	Uiso ? O
O18	1.0	0.549716	0.618567	0.147175	Uiso ? O
O19	1.0	0.013367	0.073910	0.536671	Uiso ? O
O20	1.0	0.749190	0.866070	0.096267	Uiso ? O
O21	1.0	0.466144	0.629258	0.534116	Uiso ? O
O22	1.0	0.257099	0.389424	0.082451	Uiso ? O
O23	1.0	0.774270	0.823320	0.532317	Uiso ? O
O24	1.0	0.993199	0.139173	0.098883	Uiso ? O
O25	1.0	0.546823	0.527924	0.831914	Uiso ? O
O26	1.0	0.272510	0.523620	0.339950	Uiso ? O
O27	1.0	0.906971	0.886968	0.302004	Uiso ? O
O28	1.0	0.889798	0.152351	0.788609	Uiso ? O
O29	1.0	0.367913	0.463791	0.650131	Uiso ? O
O30	1.0	0.405272	0.503244	0.075708	Uiso ? O
O31	1.0	0.851068	0.990896	0.599920	Uiso ? O
O32	1.0	0.868742	0.005315	0.016332	Uiso ? O
O33	1.0	0.566248	0.433786	0.495731	Uiso ? O
O34	1.0	0.220768	0.583484	0.008568	Uiso ? O
O35	1.0	0.966831	0.815407	0.618313	Uiso ? O
O36	1.0	0.798065	0.191889	0.098631	Uiso ? O
O37	1.0	0.180889	0.549863	0.656990	Uiso ? O
O38	1.0	0.589329	0.421497	0.135804	Uiso ? O
O39	1.0	0.840179	0.173476	0.446953	Uiso ? O
O40	1.0	0.927168	0.812217	0.969828	Uiso ? O
O41	1.0	0.281675	0.892171	0.891764	Uiso ? O
O42	1.0	0.493598	0.102827	0.336725	Uiso ? O
O43	1.0	0.262266	0.713555	0.748274	Uiso ? O
O44	1.0	0.476499	0.301819	0.309046	Uiso ? O
O45	1.0	0.693139	0.082717	0.310991	Uiso ? O
O46	1.0	0.085146	0.893147	0.856584	Uiso ? O

O47	1.0	0.076448	0.693221	0.839424	Uiso ? O
O48	1.0	0.674995	0.280764	0.347007	Uiso ? O
O49	1.0	0.804377	0.640590	0.069122	Uiso ? O
O50	1.0	0.765480	0.523351	0.394798	Uiso ? O
Al1	1.0	0.482403	0.509017	0.624750	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.250866	0.255888	0.604137	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.500469	0.733912	0.119013	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.130557	0.081473	0.501835	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.642066	0.890868	0.994118	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.485098	0.743327	0.520777	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.260491	0.272824	0.030166	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.658964	0.858726	0.584138	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.114098	0.125962	0.101824	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.289323	0.499561	0.126953	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.875500	0.879855	0.513013	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.888311	0.122506	0.001675	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.262919	0.476599	0.543788	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.521464	0.516620	0.046227	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.898588	0.098219	0.593245	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.863822	0.893542	0.096281	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.340795	0.788330	0.819813	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.416504	0.203539	0.320263	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.591464	0.028427	0.294799	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.179794	0.956886	0.823572	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.186588	0.632793	0.813593	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.576166	0.360475	0.326790	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.749890	0.183958	0.299928	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.015863	0.803239	0.820511	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.669769	0.601166	0.750891	Uiso ? Cu

• **mor-12mr-co.cif**

```
#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'C1 O49 Al1 Si23 Cu1'
_cell_length_a              13.508045
_cell_length_b              13.337077
_cell_length_c              7.372301
_cell_angle_alpha           89.552368
_cell_angle_beta            90.313110
_cell_angle_gamma           84.151268
_cell_volume                1321.197390
_space_group_name_H-M_alt   'P 1'
_space_group_IT_number      1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
```

'x, y, z'

loop\_

\_atom\_site\_label

\_atom\_site\_occupancy

\_atom\_site\_fract\_x

\_atom\_site\_fract\_y

\_atom\_site\_fract\_z

\_atom\_site\_adp\_type

\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv

\_atom\_site\_type\_symbol

C1	1.0	0.788568	0.617535	0.810475	Uiso ? C
O1	1.0	0.160591	0.187470	0.566597	Uiso ? O
O2	1.0	0.591044	0.778078	0.005461	Uiso ? O
O3	1.0	0.602110	0.755885	0.587383	Uiso ? O
O4	1.0	0.151319	0.234532	0.083140	Uiso ? O
O5	1.0	0.280293	0.254959	0.815574	Uiso ? O
O6	1.0	0.476953	0.787190	0.305898	Uiso ? O
O7	1.0	0.154885	0.065511	0.281204	Uiso ? O
O8	1.0	0.663026	0.906700	0.784319	Uiso ? O
O9	1.0	0.352097	0.196366	0.501464	Uiso ? O
O10	1.0	0.405549	0.736502	0.983175	Uiso ? O
O11	1.0	0.190433	0.984744	0.603594	Uiso ? O
O12	1.0	0.582038	0.972329	0.093813	Uiso ? O
O13	1.0	0.414207	0.817347	0.648406	Uiso ? O
O14	1.0	0.346317	0.207032	0.140542	Uiso ? O
O15	1.0	0.600153	0.938085	0.448626	Uiso ? O
O16	1.0	0.158699	0.059141	0.925979	Uiso ? O
O17	1.0	0.226643	0.363758	0.517643	Uiso ? O
O18	1.0	0.542926	0.613596	0.151350	Uiso ? O
O19	1.0	0.013825	0.074835	0.528175	Uiso ? O
O20	1.0	0.753697	0.857093	0.099130	Uiso ? O
O21	1.0	0.465694	0.631137	0.530495	Uiso ? O
O22	1.0	0.249679	0.391225	0.074809	Uiso ? O
O23	1.0	0.774108	0.823001	0.521362	Uiso ? O
O24	1.0	0.993267	0.133734	0.096856	Uiso ? O
O25	1.0	0.547379	0.532855	0.829330	Uiso ? O
O26	1.0	0.277518	0.522014	0.335835	Uiso ? O
O27	1.0	0.911055	0.884998	0.298362	Uiso ? O
O28	1.0	0.891965	0.149427	0.785499	Uiso ? O
O29	1.0	0.375518	0.460961	0.642122	Uiso ? O
O30	1.0	0.404293	0.495163	0.061246	Uiso ? O
O31	1.0	0.853587	0.988383	0.596237	Uiso ? O
O32	1.0	0.868029	0.000486	0.010019	Uiso ? O
O33	1.0	0.572898	0.436425	0.487796	Uiso ? O
O34	1.0	0.223731	0.586658	0.007771	Uiso ? O
O35	1.0	0.965491	0.810645	0.615183	Uiso ? O
O36	1.0	0.799423	0.188217	0.094641	Uiso ? O
O37	1.0	0.188265	0.544785	0.656269	Uiso ? O
O38	1.0	0.587740	0.416417	0.126455	Uiso ? O

O39	1.0	0.838331	0.171004	0.444633	Uiso ? O
O40	1.0	0.930728	0.806698	0.968138	Uiso ? O
O41	1.0	0.281122	0.891864	0.886123	Uiso ? O
O42	1.0	0.495241	0.102661	0.318782	Uiso ? O
O43	1.0	0.265845	0.712169	0.741548	Uiso ? O
O44	1.0	0.475953	0.302938	0.317272	Uiso ? O
O45	1.0	0.694511	0.077405	0.300873	Uiso ? O
O46	1.0	0.084886	0.891039	0.849441	Uiso ? O
O47	1.0	0.080253	0.690332	0.829048	Uiso ? O
O48	1.0	0.673589	0.276294	0.339606	Uiso ? O
O49	1.0	0.871783	0.602044	0.820039	Uiso ? O
Al1	1.0	0.488258	0.509900	0.617222	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.254875	0.251817	0.601845	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.501522	0.730320	0.115654	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.131303	0.079757	0.495038	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.647580	0.880341	0.995759	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.485549	0.745056	0.514954	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.258083	0.273037	0.028145	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.661003	0.858492	0.583402	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.113735	0.123313	0.096861	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.289229	0.498471	0.121532	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.876984	0.877347	0.507830	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.888962	0.118155	0.997530	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.270165	0.473237	0.539080	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.519892	0.512367	0.040970	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.899681	0.096817	0.588333	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.866966	0.888558	0.093510	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.342275	0.789011	0.813737	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.417388	0.203280	0.319099	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.591812	0.024616	0.291622	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.179161	0.955198	0.816581	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.190813	0.630921	0.808704	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.577674	0.359652	0.323199	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.749871	0.180306	0.294546	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.017269	0.799243	0.814867	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.649634	0.633878	0.787084	Uiso ? Cu

• **mor-12mr.cif**

```

#=====
# CRYSTAL DATA
#-----
data_VESTA_phase_1

_chemical_name_common      'O48 Al1 Si23 Cu1'
_cell_length_a              13.500870
_cell_length_b              13.392320
_cell_length_c              7.392447
_cell_angle_alpha          89.700012
_cell_angle_beta           90.334679

```



\_cell\_angle\_gamma 83.920792  
\_cell\_volume 1329.050967  
\_space\_group\_name\_H-M\_alt 'P 1'  
\_space\_group\_IT\_number 1

loop\_  
\_space\_group\_symop\_operation\_xyz  
'x, y, z'

loop\_  
\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_occupancy  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z  
\_atom\_site\_adp\_type  
\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv  
\_atom\_site\_type\_symbol  
01 1.0 0.162075 0.188178 0.565215 Uiso ? O  
02 1.0 0.597300 0.773250 0.003431 Uiso ? O  
03 1.0 0.605780 0.756824 0.579163 Uiso ? O  
04 1.0 0.153067 0.233310 0.073454 Uiso ? O  
05 1.0 0.283936 0.255204 0.809682 Uiso ? O  
06 1.0 0.480004 0.783570 0.299016 Uiso ? O  
07 1.0 0.158171 0.067679 0.278260 Uiso ? O  
08 1.0 0.664430 0.904405 0.782776 Uiso ? O  
09 1.0 0.353182 0.193599 0.494932 Uiso ? O  
010 1.0 0.410356 0.736141 0.974597 Uiso ? O  
011 1.0 0.193014 0.986085 0.599022 Uiso ? O  
012 1.0 0.582841 0.966661 0.093637 Uiso ? O  
013 1.0 0.416431 0.814699 0.639792 Uiso ? O  
014 1.0 0.347608 0.206252 0.134695 Uiso ? O  
015 1.0 0.599501 0.939975 0.449655 Uiso ? O  
016 1.0 0.162033 0.056224 0.924308 Uiso ? O  
017 1.0 0.230135 0.362630 0.511751 Uiso ? O  
018 1.0 0.544153 0.609879 0.144618 Uiso ? O  
019 1.0 0.016046 0.075956 0.523002 Uiso ? O  
020 1.0 0.757670 0.856755 0.095225 Uiso ? O  
021 1.0 0.472471 0.628817 0.528094 Uiso ? O  
022 1.0 0.250427 0.389985 0.069720 Uiso ? O  
023 1.0 0.775608 0.826056 0.513702 Uiso ? O  
024 1.0 0.995993 0.132167 0.092319 Uiso ? O  
025 1.0 0.551404 0.524261 0.826506 Uiso ? O  
026 1.0 0.278889 0.520605 0.329692 Uiso ? O  
027 1.0 0.914612 0.885344 0.294064 Uiso ? O  
028 1.0 0.894131 0.148226 0.782270 Uiso ? O  
029 1.0 0.378014 0.461053 0.634941 Uiso ? O  
030 1.0 0.405904 0.492165 0.056246 Uiso ? O  
031 1.0 0.857520 0.987673 0.593365 Uiso ? O  
032 1.0 0.871736 0.999067 0.004834 Uiso ? O

O33	1.0	0.575777	0.432667	0.483388	Uiso ? O
O34	1.0	0.226033	0.584837	0.001555	Uiso ? O
O35	1.0	0.966968	0.809204	0.610353	Uiso ? O
O36	1.0	0.801620	0.185372	0.091922	Uiso ? O
O37	1.0	0.190612	0.543435	0.650462	Uiso ? O
O38	1.0	0.589201	0.412187	0.124391	Uiso ? O
O39	1.0	0.838630	0.168753	0.441997	Uiso ? O
O40	1.0	0.935059	0.806164	0.964375	Uiso ? O
O41	1.0	0.283613	0.889477	0.877257	Uiso ? O
O42	1.0	0.497839	0.102898	0.309376	Uiso ? O
O43	1.0	0.270101	0.708767	0.736476	Uiso ? O
O44	1.0	0.475112	0.302395	0.314963	Uiso ? O
O45	1.0	0.697521	0.072801	0.293353	Uiso ? O
O46	1.0	0.087497	0.890235	0.839549	Uiso ? O
O47	1.0	0.083595	0.689986	0.822230	Uiso ? O
O48	1.0	0.672398	0.270201	0.335069	Uiso ? O
Al1	1.0	0.492136	0.506651	0.612894	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.257317	0.251248	0.596950	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.505300	0.726786	0.109355	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.133625	0.081024	0.491416	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.651094	0.877292	0.993789	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.488916	0.743043	0.507625	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.259801	0.272284	0.021528	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.663156	0.860148	0.579395	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.116531	0.122420	0.092162	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.290609	0.496502	0.115929	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.879855	0.877479	0.502591	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.891628	0.116473	0.993444	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.272518	0.472145	0.532591	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.522008	0.507503	0.037273	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.901940	0.096216	0.585000	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.870972	0.887907	0.089248	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.345233	0.786883	0.806129	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.418354	0.202209	0.313235	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.593360	0.022788	0.287313	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.181695	0.954193	0.810066	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.193706	0.629185	0.802861	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.578543	0.355919	0.319898	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.751271	0.176374	0.290153	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.019969	0.798462	0.808538	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.621869	0.646189	0.777587	Uiso ? Cu

• **mor-8mr-2co.cif**

#=====

# CRYSTAL DATA

#-----

data\_VESTA\_phase\_1

\_chemical\_name\_common

'C2 O50 Al1 Si23 Cu1'

\_cell\_length\_a 13.417845  
\_cell\_length\_b 13.473189  
\_cell\_length\_c 7.376014  
\_cell\_angle\_alpha 89.308281  
\_cell\_angle\_beta 89.625175  
\_cell\_angle\_gamma 83.561935  
\_cell\_volume 1324.920551  
\_space\_group\_name\_H-M\_alt 'P 1'  
\_space\_group\_IT\_number 1

loop\_  
\_space\_group\_symop\_operation\_xyz  
'x, y, z'

loop\_  
\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_occupancy  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z  
\_atom\_site\_adp\_type  
\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv  
\_atom\_site\_type\_symbol  
C1 1.0 0.304711 0.908059 0.335689 Uiso ? C  
C2 1.0 0.211664 0.715279 0.291355 Uiso ? C  
O1 1.0 0.166627 0.214545 0.529791 Uiso ? O  
O2 1.0 0.605816 0.776373 0.074011 Uiso ? O  
O3 1.0 0.614930 0.772265 0.516871 Uiso ? O  
O4 1.0 0.176079 0.211989 0.063563 Uiso ? O  
O5 1.0 0.305154 0.210198 0.787637 Uiso ? O  
O6 1.0 0.471894 0.712436 0.307487 Uiso ? O  
O7 1.0 0.115227 0.078754 0.299530 Uiso ? O  
O8 1.0 0.610759 0.899802 0.791720 Uiso ? O  
O9 1.0 0.355224 0.243110 0.445220 Uiso ? O  
O10 1.0 0.409591 0.791926 0.994922 Uiso ? O  
O11 1.0 0.162580 0.025800 0.631434 Uiso ? O  
O12 1.0 0.568333 0.970092 0.122869 Uiso ? O  
O13 1.0 0.429449 0.767669 0.635847 Uiso ? O  
O14 1.0 0.369708 0.165534 0.118133 Uiso ? O  
O15 1.0 0.646563 0.960497 0.455907 Uiso ? O  
O16 1.0 0.198364 0.017811 0.987967 Uiso ? O  
O17 1.0 0.242749 0.379528 0.624871 Uiso ? O  
O18 1.0 0.517775 0.618189 0.996262 Uiso ? O  
O19 1.0 0.991699 0.142652 0.565331 Uiso ? O  
O20 1.0 0.751912 0.890235 0.045110 Uiso ? O  
O21 1.0 0.545523 0.594931 0.575293 Uiso ? O  
O22 1.0 0.295786 0.352509 0.040118 Uiso ? O  
O23 1.0 0.782150 0.841155 0.625493 Uiso ? O  
O24 1.0 0.020505 0.121824 0.985066 Uiso ? O  
O25 1.0 0.472522 0.455195 0.830110 Uiso ? O

O26	1.0	0.217469	0.470541	0.305387	Uiso ? O
O27	1.0	0.878257	0.830342	0.309315	Uiso ? O
O28	1.0	0.855752	0.095597	0.810643	Uiso ? O
O29	1.0	0.365056	0.517818	0.511283	Uiso ? O
O30	1.0	0.377936	0.516213	0.130574	Uiso ? O
O31	1.0	0.901018	0.980146	0.528063	Uiso ? O
O32	1.0	0.907123	0.987474	0.107549	Uiso ? O
O33	1.0	0.551969	0.386932	0.493451	Uiso ? O
O34	1.0	0.200892	0.532979	0.967188	Uiso ? O
O35	1.0	0.977896	0.796905	0.616698	Uiso ? O
O36	1.0	0.847589	0.180728	0.138531	Uiso ? O
O37	1.0	0.180260	0.571455	0.615061	Uiso ? O
O38	1.0	0.573164	0.447906	0.150013	Uiso ? O
O39	1.0	0.798182	0.160376	0.487432	Uiso ? O
O40	1.0	0.932481	0.803516	0.969106	Uiso ? O
O41	1.0	0.271494	0.871754	0.767479	Uiso ? O
O42	1.0	0.502464	0.101757	0.374298	Uiso ? O
O43	1.0	0.296431	0.674814	0.819928	Uiso ? O
O44	1.0	0.502609	0.279451	0.217574	Uiso ? O
O45	1.0	0.684529	0.102017	0.225927	Uiso ? O
O46	1.0	0.077609	0.899533	0.844376	Uiso ? O
O47	1.0	0.098983	0.700340	0.856856	Uiso ? O
O48	1.0	0.694927	0.296393	0.279958	Uiso ? O
O49	1.0	0.350840	0.969508	0.371734	Uiso ? O
O50	1.0	0.134853	0.756221	0.269464	Uiso ? O
Al1	1.0	0.487780	0.485998	0.604273	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.267448	0.259997	0.595234	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.503513	0.724899	0.093102	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.108361	0.116188	0.508280	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.634978	0.884970	0.006178	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.519899	0.708012	0.517422	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.287394	0.235876	0.000256	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.662175	0.868052	0.597631	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.127385	0.107804	0.087953	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.272651	0.465560	0.107654	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.884040	0.863081	0.518854	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.906021	0.096287	0.009984	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.253321	0.482540	0.514839	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.487805	0.504556	0.019942	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.886782	0.094728	0.597214	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.867560	0.878188	0.106900	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.352105	0.775948	0.804961	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.432948	0.197607	0.291354	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.599824	0.033740	0.295697	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.177740	0.954313	0.808528	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.194066	0.620105	0.813055	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.581390	0.353823	0.292342	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.755632	0.186433	0.284216	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.022134	0.799342	0.821114	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.337603	0.641919	0.326771	Uiso ? Cu

- **mor-8mr-co.cif**

```
#=====
```

```
# CRYSTAL DATA
```

```
#-----
```

```
data_VESTA_phase_1
```

```
_chemical_name_common      'C1 O49 Al1 Si23 Cu1'
_cell_length_a             13.426720
_cell_length_b             13.465682
_cell_length_c             7.391146
_cell_angle_alpha         89.379745
_cell_angle_beta          89.608200
_cell_angle_gamma         83.376282
_cell_volume               1327.300181
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1
```

```
loop_
```

```
_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'
```

```
loop_
```

```
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0  0.230041  0.742514  0.293712  Uiso ? C
O1      1.0  0.166430  0.222490  0.531363  Uiso ? O
O2      1.0  0.609814  0.779567  0.072376  Uiso ? O
O3      1.0  0.620162  0.773913  0.522118  Uiso ? O
O4      1.0  0.173772  0.220847  0.061493  Uiso ? O
O5      1.0  0.304811  0.219895  0.789824  Uiso ? O
O6      1.0  0.476682  0.718835  0.309771  Uiso ? O
O7      1.0  0.117041  0.086708  0.298866  Uiso ? O
O8      1.0  0.615176  0.904217  0.792934  Uiso ? O
O9      1.0  0.355318  0.248481  0.448327  Uiso ? O
O10     1.0  0.412781  0.796363  0.997400  Uiso ? O
O11     1.0  0.170101  0.032464  0.627310  Uiso ? O
O12     1.0  0.570184  0.973278  0.122627  Uiso ? O
O13     1.0  0.433334  0.776103  0.637845  Uiso ? O
O14     1.0  0.366360  0.171864  0.120417  Uiso ? O
O15     1.0  0.645594  0.963375  0.456847  Uiso ? O
O16     1.0  0.197866  0.026385  0.985697  Uiso ? O
O17     1.0  0.241728  0.387867  0.622770  Uiso ? O
O18     1.0  0.520756  0.621751  0.001062  Uiso ? O
```

O19	1.0	0.995004	0.145735	0.569599	Uiso ? O
O20	1.0	0.754689	0.894613	0.048463	Uiso ? O
O21	1.0	0.544695	0.599970	0.578757	Uiso ? O
O22	1.0	0.295354	0.360036	0.046362	Uiso ? O
O23	1.0	0.785738	0.846321	0.623105	Uiso ? O
O24	1.0	0.018851	0.129932	0.988608	Uiso ? O
O25	1.0	0.470296	0.461273	0.832196	Uiso ? O
O26	1.0	0.215731	0.481580	0.305560	Uiso ? O
O27	1.0	0.883357	0.833836	0.307986	Uiso ? O
O28	1.0	0.857380	0.098102	0.809605	Uiso ? O
O29	1.0	0.364181	0.524964	0.511586	Uiso ? O
O30	1.0	0.377917	0.523615	0.133596	Uiso ? O
O31	1.0	0.904768	0.983936	0.525754	Uiso ? O
O32	1.0	0.908115	0.993638	0.110541	Uiso ? O
O33	1.0	0.548665	0.392068	0.494958	Uiso ? O
O34	1.0	0.202477	0.540789	0.965862	Uiso ? O
O35	1.0	0.981438	0.800480	0.616094	Uiso ? O
O36	1.0	0.842866	0.185744	0.134592	Uiso ? O
O37	1.0	0.180179	0.581011	0.616333	Uiso ? O
O38	1.0	0.571524	0.449257	0.150555	Uiso ? O
O39	1.0	0.801931	0.163961	0.486326	Uiso ? O
O40	1.0	0.936015	0.811144	0.967046	Uiso ? O
O41	1.0	0.273026	0.876966	0.773380	Uiso ? O
O42	1.0	0.496288	0.100328	0.372822	Uiso ? O
O43	1.0	0.301699	0.679869	0.817680	Uiso ? O
O44	1.0	0.504338	0.279374	0.222797	Uiso ? O
O45	1.0	0.680998	0.107849	0.234416	Uiso ? O
O46	1.0	0.077553	0.910432	0.835537	Uiso ? O
O47	1.0	0.105425	0.711853	0.861860	Uiso ? O
O48	1.0	0.694566	0.301261	0.288553	Uiso ? O
O49	1.0	0.164683	0.801458	0.270877	Uiso ? O
Al1	1.0	0.486199	0.491786	0.606871	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.267027	0.267940	0.596656	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.507098	0.729422	0.095230	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.111327	0.122266	0.508094	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.638271	0.888697	0.006938	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.522691	0.713447	0.520164	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.285721	0.244024	0.002253	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.665439	0.871624	0.598782	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.126743	0.115813	0.087416	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.272207	0.473994	0.109499	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.887939	0.866915	0.517221	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.905346	0.101810	0.010065	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.251808	0.491397	0.514824	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.487683	0.509354	0.022193	Uiso ? Si
Si14	1.0	0.889908	0.098111	0.597245	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.870572	0.883598	0.107636	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.355767	0.782179	0.806596	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.431114	0.200464	0.293634	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.597913	0.036692	0.297945	Uiso ? Si

Si19	1.0	0.180143	0.962123	0.806272	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.197443	0.628607	0.813693	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.580093	0.356902	0.296117	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.754668	0.190738	0.287238	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.025475	0.807846	0.819328	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.341261	0.646959	0.330207	Uiso ? Cu

• **mor-8mr.cif**

#=====

# CRYSTAL DATA

#-----

data\_VESTA\_phase\_1

```

_chemical_name_common      'O48 Al1 Si23 Cu1'
_cell_length_a             13.443192
_cell_length_b             13.533347
_cell_length_c             7.414071
_cell_angle_alpha         89.404060
_cell_angle_beta          89.465034
_cell_angle_gamma         83.261230
_cell_volume               1339.416400
_space_group_name_H-M_alt  'P 1'
_space_group_IT_number     1

```

loop\_

```

_space_group_symop_operation_xyz
  'x, y, z'

```

loop\_

```

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
01      1.0  0.168160  0.216350  0.525088  Uiso ? O
02      1.0  0.603723  0.784953  0.075711  Uiso ? O
03      1.0  0.621996  0.770748  0.529394  Uiso ? O
04      1.0  0.171297  0.221138  0.062684  Uiso ? O
05      1.0  0.301260  0.222029  0.790135  Uiso ? O
06      1.0  0.472493  0.727517  0.318645  Uiso ? O
07      1.0  0.114435  0.084483  0.292871  Uiso ? O
08      1.0  0.613680  0.905325  0.792364  Uiso ? O
09      1.0  0.354536  0.253118  0.451433  Uiso ? O
010     1.0  0.405952  0.797068  0.006202  Uiso ? O
011     1.0  0.167220  0.027873  0.619783  Uiso ? O
012     1.0  0.568413  0.978843  0.117187  Uiso ? O

```

013	1.0	0.437107	0.778872	0.652566	Uiso ? O
014	1.0	0.364525	0.178490	0.121207	Uiso ? O
015	1.0	0.635616	0.960894	0.453577	Uiso ? O
016	1.0	0.196193	0.029190	0.977331	Uiso ? O
017	1.0	0.229051	0.385696	0.619135	Uiso ? O
018	1.0	0.518591	0.625051	0.013720	Uiso ? O
019	1.0	0.995130	0.145472	0.566928	Uiso ? O
020	1.0	0.752043	0.894100	0.048491	Uiso ? O
021	1.0	0.538854	0.600352	0.575659	Uiso ? O
022	1.0	0.288829	0.363323	0.041843	Uiso ? O
023	1.0	0.783381	0.851928	0.618134	Uiso ? O
024	1.0	0.016799	0.130357	0.985333	Uiso ? O
025	1.0	0.480868	0.460470	0.841236	Uiso ? O
026	1.0	0.216441	0.484977	0.306286	Uiso ? O
027	1.0	0.882342	0.836155	0.304857	Uiso ? O
028	1.0	0.856389	0.098860	0.805339	Uiso ? O
029	1.0	0.365482	0.508925	0.525881	Uiso ? O
030	1.0	0.377629	0.521498	0.130668	Uiso ? O
031	1.0	0.902218	0.987261	0.518192	Uiso ? O
032	1.0	0.905905	0.993362	0.103245	Uiso ? O
033	1.0	0.556151	0.389996	0.504277	Uiso ? O
034	1.0	0.201439	0.545075	0.967036	Uiso ? O
035	1.0	0.979025	0.805108	0.613367	Uiso ? O
036	1.0	0.840880	0.184165	0.131266	Uiso ? O
037	1.0	0.182234	0.581064	0.615840	Uiso ? O
038	1.0	0.571605	0.454866	0.166287	Uiso ? O
039	1.0	0.802512	0.168093	0.484757	Uiso ? O
040	1.0	0.933638	0.811272	0.963633	Uiso ? O
041	1.0	0.271355	0.877313	0.773622	Uiso ? O
042	1.0	0.493981	0.104988	0.369477	Uiso ? O
043	1.0	0.301190	0.680954	0.813720	Uiso ? O
044	1.0	0.502113	0.285466	0.226923	Uiso ? O
045	1.0	0.681125	0.106667	0.242484	Uiso ? O
046	1.0	0.075808	0.910773	0.837897	Uiso ? O
047	1.0	0.103574	0.713312	0.854010	Uiso ? O
048	1.0	0.694187	0.300782	0.281597	Uiso ? O
Al1	1.0	0.489727	0.487464	0.615112	Uiso ? Al
Si1	1.0	0.263492	0.267300	0.595738	Uiso ? Si
Si2	1.0	0.502172	0.733978	0.102265	Uiso ? Si
Si3	1.0	0.110542	0.118722	0.502215	Uiso ? Si
Si4	1.0	0.635317	0.891624	0.006233	Uiso ? Si
Si5	1.0	0.521559	0.715450	0.527675	Uiso ? Si
Si6	1.0	0.282001	0.246957	0.001932	Uiso ? Si
Si7	1.0	0.662777	0.872299	0.597985	Uiso ? Si
Si8	1.0	0.124632	0.116187	0.083219	Uiso ? Si
Si9	1.0	0.269867	0.476422	0.108503	Uiso ? Si
Si10	1.0	0.886105	0.870595	0.512789	Uiso ? Si
Si11	1.0	0.903722	0.101482	0.005689	Uiso ? Si
Si12	1.0	0.249347	0.487949	0.517689	Uiso ? Si
Si13	1.0	0.490184	0.511107	0.030024	Uiso ? Si



Si14	1.0	0.889229	0.100066	0.593782	Uiso ? Si
Si15	1.0	0.868371	0.883952	0.103897	Uiso ? Si
Si16	1.0	0.353659	0.783507	0.811594	Uiso ? Si
Si17	1.0	0.429228	0.205845	0.294274	Uiso ? Si
Si18	1.0	0.594421	0.038501	0.297236	Uiso ? Si
Si19	1.0	0.177957	0.961931	0.803035	Uiso ? Si
Si20	1.0	0.196734	0.630553	0.811572	Uiso ? Si
Si21	1.0	0.581423	0.358435	0.301597	Uiso ? Si
Si22	1.0	0.754190	0.190744	0.286228	Uiso ? Si
Si23	1.0	0.023313	0.809283	0.816184	Uiso ? Si
Cu1	1.0	0.376828	0.622607	0.349101	Uiso ? Cu