

Cu-opt

64

Cu 1 0 0.02051
Cu 0.33333 0.16667 0.0993
Cu 0.16719 0.33349 0.17592
Cu -0.00008 0.00005 0.25337
Cu 0.99995 0.24998 0.02045
Cu 0.33321 0.41661 0.09921
Cu 0.16724 0.08389 0.17588
Cu -0.00013 0.24998 0.25332
Cu 0.25002 0.24998 0.02045
Cu 0.08339 0.41661 0.09921
Cu 0.41727 0.08488 0.17646
Cu 0.24604 0.24819 0.25325
Cu 0.25002 0.00005 0.02045
Cu 0.08339 0.16679 0.09921
Cu 0.4181 0.33414 0.17695
Cu 0.2482 -0.00237 0.25283
Cu 0.5 0 0.02051
Cu 0.83333 0.16667 0.0993
Cu 0.66589 0.33407 0.17701
Cu 0.49919 0.99771 0.25281
Cu 0.49995 0.24998 0.02045
Cu 0.83321 0.41661 0.09921
Cu 0.66653 0.0839 0.17588
Cu 0.49501 0.2405 0.25734
Cu 0.75002 0.24998 0.02045
Cu 0.58339 0.41661 0.09921
Cu 0.91665 0.08335 0.17571
Cu 0.75177 0.24822 0.25326
Cu 0.75002 0.00005 0.02045
Cu 0.58339 0.16679 0.09921
Cu 0.91608 0.33345 0.17588
Cu 0.75001 0.00011 0.25332
Cu 1 0.5 0.02051
Cu 0.33333 0.66667 0.0993
Cu 0.16679 0.83317 0.17535
Cu 0.00221 0.50077 0.25281
Cu 0.99995 0.74998 0.02045
Cu 0.33321 0.91661 0.09921
Cu 0.16672 0.58384 0.17532
Cu 0.00231 0.75175 0.25283
Cu 0.25002 0.74998 0.02045
Cu 0.08339 0.91661 0.09921

Cu 0.41734 0.58265 0.17645
Cu 0.24985 0.75009 0.25305
Cu 0.25002 0.50005 0.02045
Cu 0.08339 0.66679 0.09921
Cu 0.41615 0.83325 0.17532
Cu 0.24817 0.50097 0.2528
Cu 0.5 0.5 0.02051
Cu 0.83333 0.66667 0.0993
Cu 0.66651 0.83281 0.17592
Cu 0.49493 0.50502 0.25737
Cu 0.49995 0.74998 0.02045
Cu 0.83321 0.91661 0.09921
Cu 0.66582 0.58187 0.17695
Cu 0.49901 0.75179 0.2528
Cu 0.75002 0.74998 0.02045
Cu 0.58339 0.91661 0.09921
Cu 0.91508 0.5827 0.17647
Cu 0.75178 0.75394 0.25324
Cu 0.75002 0.50005 0.02045
Cu 0.58339 0.66679 0.09921
Cu 0.91609 0.83274 0.17588
Cu 0.75937 0.50493 0.25735

CuZn₄-opt

64

Cu	0.13333	0.17099	0.11203
Cu	0.13205	0.16931	0.26692
Cu	0.46762	0.00224	0.18984
Cu	0.62968	0.16984	0.11179
Cu	0.96558	0.00257	0.03537
Cu	0.21655	0.25532	0.18991
Cu	0.63373	0.41879	0.26793
Cu	0.71675	0.25165	0.18922
Cu	0.13325	0.6674	0.11215
Cu	0.46665	0.5029	0.0349
Cu	0.88425	0.6684	0.11136
Cu	0.38372	0.9186	0.11198
Cu	0.63219	0.91995	0.11155
Zn	0.21466	0.00262	0.03148
Zn	0.2219	0.01017	0.18902
Zn	0.38427	0.15957	0.1129
Zn	0.37841	0.16931	0.27008
Zn	0.46678	0.00021	0.03156
Zn	0.63418	0.1743	0.27268
Zn	0.71587	0.00471	0.03093
Zn	0.7104	0.00806	0.18836
Zn	0.88111	0.16829	0.11162
Zn	0.88019	0.17556	0.27286
Zn	0.96247	0.00555	0.1915
Zn	0.13098	0.42082	0.11126
Zn	0.13342	0.41269	0.27317
Zn	0.21649	0.25176	0.03012
Zn	0.38223	0.41902	0.1096
Zn	0.38668	0.41801	0.2763
Zn	0.46677	0.25331	0.02968
Zn	0.46631	0.2501	0.18983
Zn	0.63297	0.41586	0.11141
Zn	0.71556	0.25111	0.02928
Zn	0.88325	0.42153	0.10982
Zn	0.88365	0.41538	0.27657
Zn	0.96686	0.24731	0.02971
Zn	0.96872	0.25335	0.19032
Zn	0.13319	0.66921	0.27509
Zn	0.21876	0.50416	0.02874
Zn	0.21757	0.49975	0.19096
Zn	0.38041	0.67225	0.11
Zn	0.3857	0.66761	0.27531

Zn	0.46951	0.49877	0.1922
Zn	0.63298	0.67693	0.11032
Zn	0.63322	0.66622	0.27539
Zn	0.71117	0.5021	0.02691
Zn	0.71684	0.5003	0.19228
Zn	0.88235	0.66863	0.27518
Zn	0.96568	0.50415	0.02866
Zn	0.96636	0.50223	0.19072
Zn	0.13419	0.92063	0.11085
Zn	0.13346	0.92497	0.27407
Zn	0.21417	0.75333	0.02856
Zn	0.2156	0.7532	0.19043
Zn	0.37955	0.92432	0.27336
Zn	0.4643	0.75123	0.02815
Zn	0.46615	0.75788	0.19028
Zn	0.63042	0.92163	0.27262
Zn	0.7178	0.75437	0.03076
Zn	0.71411	0.7574	0.18967
Zn	0.87911	0.91526	0.10948
Zn	0.88116	0.92044	0.27427
Zn	0.96839	0.75352	0.03061
Zn	0.96645	0.75135	0.18884

Cu₅Zn₈-opt

104

Zn	0.99493	0.69554	0.1765
Zn	0.00835	0.18813	0.37993
Zn	0.00764	0.96652	0.03854
Zn	0.99466	0.45909	0.24192
Zn	0.36646	0.6491	0.16949
Zn	0.37104	0.15178	0.37363
Zn	0.37151	0.00346	0.04485
Zn	0.36676	0.50601	0.24903
Zn	0.99465	0.95941	0.17653
Zn	0.0073	0.46698	0.37991
Zn	0.36677	0.00598	0.16953
Zn	0.37154	0.50381	0.37364
Zn	0.00781	0.68807	0.03853
Zn	0.99457	0.1958	0.24191
Zn	0.37144	0.65142	0.04477
Zn	0.36682	0.14902	0.24892
Zn	0.71953	0.32743	0.03563
Zn	0.7206	0.82729	0.23046
Zn	0.65782	0.50879	0.11041
Zn	0.65787	0.00902	0.30805
Zn	0.65794	0.14637	0.11031
Zn	0.65812	0.64657	0.30803
Zn	0.72053	0.32753	0.18793
Zn	0.71942	0.82794	0.3829
Zn	0.49493	0.19554	0.1765
Zn	0.50835	0.68813	0.37993
Zn	0.50764	0.46652	0.03854
Zn	0.49466	0.9591	0.24192
Zn	0.86646	0.1491	0.16949
Zn	0.87104	0.65178	0.37363
Zn	0.87151	0.50346	0.04485
Zn	0.86676	0.00601	0.24903
Zn	0.49465	0.45941	0.17653
Zn	0.5073	0.96698	0.37991
Zn	0.86677	0.50598	0.16953
Zn	0.87154	0.00381	0.37364
Zn	0.50781	0.18807	0.03853
Zn	0.49457	0.6958	0.24191
Zn	0.87144	0.15142	0.04477
Zn	0.86682	0.64902	0.24892
Zn	0.21953	0.82743	0.03563
Zn	0.2206	0.32729	0.23046

Zn	0.15782	0.00879	0.11041
Zn	0.15787	0.50902	0.30805
Zn	0.15794	0.64637	0.11031
Zn	0.15812	0.14655	0.30802
Zn	0.22053	0.82753	0.18793
Zn	0.21942	0.32794	0.3829
Zn	0.78045	0.82756	0.14792
Zn	0.79053	0.32729	0.36351
Zn	0.79049	0.82722	0.05494
Zn	0.78026	0.32767	0.27057
Zn	0.55799	0.71289	0.11099
Zn	0.55796	0.21302	0.30753
Zn	0.55808	0.94238	0.11097
Zn	0.558	0.44244	0.3075
Zn	0.28045	0.32756	0.14792
Zn	0.29053	0.82729	0.36351
Zn	0.29049	0.32722	0.05494
Zn	0.28026	0.82767	0.27057
Zn	0.05799	0.21289	0.11099
Zn	0.05796	0.71302	0.30753
Zn	0.05808	0.44238	0.11097
Zn	0.05799	0.94244	0.3075
Cu	0.03127	0.82763	0.1099
Cu	0.03129	0.32774	0.30864
Cu	0.31896	0.82774	0.11349
Cu	0.31902	0.32783	0.30494
Cu	0.67554	0.00484	0.18094
Cu	0.66619	0.51169	0.37494
Cu	0.66599	0.64295	0.04356
Cu	0.67581	0.15022	0.23765
Cu	0.67543	0.65002	0.18077
Cu	0.66589	0.14332	0.37493
Cu	0.66627	0.01153	0.04348
Cu	0.67548	0.50489	0.23761
Cu	0.53127	0.32763	0.1099
Cu	0.53129	0.82774	0.30864
Cu	0.81896	0.32774	0.11349
Cu	0.81902	0.82783	0.30494
Cu	0.17554	0.50484	0.18094
Cu	0.16619	0.01169	0.37494
Cu	0.16599	0.14295	0.04356
Cu	0.17581	0.65022	0.23765
Cu	0.17543	0.15002	0.18077
Cu	0.16589	0.64331	0.37493

Cu	0.16627	0.51153	0.04348
Cu	0.17548	0.00489	0.23761
Cu	0.5074	0.82754	0.17798
Cu	0.51006	0.32764	0.3734
Cu	0.51002	0.82737	0.04512
Cu	0.50751	0.32758	0.24041
Cu	0.85341	0.65468	0.10862
Cu	0.8534	0.15468	0.3099
Cu	0.85322	0.00054	0.10861
Cu	0.85311	0.50058	0.3098
Cu	0.0074	0.32754	0.17798
Cu	0.01006	0.82764	0.3734
Cu	0.01002	0.32738	0.04512
Cu	0.00751	0.82758	0.24041
Cu	0.35341	0.15468	0.10862
Cu	0.3534	0.65468	0.3099
Cu	0.35322	0.50054	0.10861
Cu	0.35311	0.00058	0.3098

ISAA-CuZn-opt

52

Zn	0.11494	0.00003	0.01046
Zn	0.11487	0.2499	0.10021
Zn	0.11484	0.00004	0.16954
Zn	0.11523	0.25005	0.25917
Zn	0.44826	0.00001	0.01048
Zn	0.44822	0.24995	0.10022
Zn	0.4482	0.00005	0.16954
Zn	0.44853	0.24998	0.25918
Zn	0.78162	0.00003	0.01046
Zn	0.78159	0.24993	0.10022
Zn	0.78149	0.00002	0.16955
Zn	0.78184	0.24997	0.25917
Zn	0.11495	0.5	0.01048
Zn	0.11483	0.74988	0.10023
Zn	0.11485	0.50005	0.16955
Zn	0.11523	0.74996	0.25918
Zn	0.4483	0.50002	0.01048
Zn	0.44827	0.74997	0.10018
Zn	0.44818	0.50005	0.16953
Zn	0.44852	0.75003	0.25919
Zn	0.78158	0.50003	0.01046
Zn	0.7816	0.74995	0.10021
Zn	0.78147	0.50004	0.16953
Zn	0.78184	0.75003	0.25915
Cu	0.28175	0.25003	0.02242
Cu	0.28149	-0.00009	0.09084
Cu	0.28174	0.24997	0.17887
Cu	0.28164	0.00002	0.24743
Cu	0.61502	0.25001	0.02243
Cu	0.61485	0.00004	0.09082
Cu	0.61507	0.24998	0.17885
Cu	0.61499	0	0.24745
Cu	0.9483	0.25002	0.02242
Cu	0.9482	-0.00004	0.09082
Cu	0.94841	0.25003	0.17887
Cu	0.94827	0.00002	0.2474
Cu	0.2817	0.75	0.02243
Cu	0.28148	0.50007	0.09083
Cu	0.2817	0.74996	0.17884
Cu	0.28163	0.50002	0.24741
Cu	0.6151	0.75002	0.02241
Cu	0.61488	0.49999	0.09082

Cu	0.61494	0.74998	0.17885
Cu	0.61493	0.50001	0.24743
Cu	0.94835	0.75001	0.02239
Cu	0.94817	0.49997	0.09082
Cu	0.94827	0.74999	0.17888
Cu	0.94827	0.50001	0.24743