

Supplementary Materials

The cycle sequences computed with *TOPOS* for the inequivalent nodes of the six binodal-*quasi*-uninodal nets. The sequences start to differ from yellow numbers. The nodes in the first two nets cannot be distinguished with cycle sequences.

	C ₃	C ₄	C ₅	C ₆	C ₇	C ₈	C ₉	C ₁₀	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₁₄	C ₁₅	C ₁₆
cbo-e-3,3-$Pa\bar{3}$	0	0	0	1	0	0	0	0	0	13	0	28	0	100
	0	0	0	1	0	0	0	0	0	13	0	28	0	100
mbc-7,7-$P2_12_12$	3	14	40	177	679	3152	13437	63230						
	3	14	40	177	679	3152	13437	63230						
mbc-9,9-$Pca2_1$	9	40	170	922	4879	28098								
	9	40	170	920	4872	28054								
tcj-9,9-$Pna2_1$	9	38	175	906	4925	27960								
	9	38	175	906	4924	27960								
tcm-9,9-$P2_1/c$	9	38	175	906	4925	27960								
	9	38	175	906	4924	27960								
tco-9,9-$Pna2_1$	9	38	170	898	4911	28137								
	9	38	170	896	4910	28119								

Here below are the crystallographic data on all 99 new binodal nets described in the manuscript in the *Systre* input format, that gives each edge explicitly.

The same list is in the file **99nets.txt**, that if renamed as **99net.cgd** could be imported in *TOPOS* to generate a database with all 99 nets that can be read/view/examined.

```

crystal
name alb-3,6-C2/c
cell 2.6704 1.3354 2.9780 90.000 116.610 90.000
group Al2/n1
atom 1 6 0.00000 0.25000 0.25000
edge 1 -0.1873 0.2502 -0.1242
edge 1 -0.1873 -0.2498 0.3758
edge 1 -0.3127 0.7502 0.1242
edge 1 0.3127 -0.2502 0.3758
edge 1 0.1873 0.7498 0.1242
edge 1 0.1873 0.2498 0.6242
atom 2 3 0.18726 0.24980 0.62420
edge 2 0.5000 0.7500 0.7500
edge 2 0.0000 -0.2500 0.7500
edge 2 0.0000 0.2500 0.2500
end

```

```

crystal
name alb-3,6-P42/mmm
cell 1.3351 1.3351 2.6631 90.000 90.000 90.000
group P42/mmm
atom 1 3 0.00000 0.00000 0.37411
edge 1 0.5000 0.5000 0.5000
edge 1 0.0000 0.0000 0.0000
edge 1 -0.5000 -0.5000 0.5000
atom 2 6 0.00000 0.00000 0.00000
edge 2 -0.5000 0.5000 -0.1259
edge 2 0.5000 -0.5000 -0.1259
edge 2 -0.5000 0.5000 0.1259
edge 2 0.0000 0.0000 -0.3741

```

```
edge 2 0.0000 0.0000 0.3741
edge 2 0.5000 -0.5000 0.1259
end
```

```
crystal
name alb-4,8-P21/c
cell 1.3366 1.3412 2.6835 90.000 90.750 90.000
group P121/n1
atom 1 8 0.00000 0.00000 0.00000
edge 1 -0.5080 -0.4887 0.1273
edge 1 -0.0080 -0.0113 -0.3727
edge 1 -0.4920 0.4887 -0.1273
edge 1 -0.4920 -0.5113 -0.1273
edge 1 0.4920 0.5113 0.1273
edge 1 0.4920 -0.4887 0.1273
edge 1 0.0080 0.0113 0.3727
edge 1 0.5080 0.4887 -0.1273
atom 2 4 0.00800 0.01128 0.37268
edge 2 0.5000 -0.5000 0.5000
edge 2 0.5000 0.5000 0.5000
edge 2 0.0000 0.0000 0.0000
edge 2 -0.5000 0.5000 0.5000
end
```

```
crystal
name alb-4,8-P42/mmc
cell 11.7220 11.7220 23.7400 90.000 90.000 90.000
group P42/mmc
atom 1 8 0.50000 0.50000 0.25000
edge 1 0.3743 0.0000 0.0000
edge 1 0.6257 0.0000 0.0000
edge 1 0.0000 0.3743 0.5000
edge 1 0.0000 0.6257 0.5000
edge 1 1.0000 0.6257 0.5000
edge 1 1.0000 0.3743 0.5000
edge 1 0.6257 1.0000 0.0000
edge 1 0.3743 1.0000 0.0000
atom 2 4 0.37430 0.00000 0.00000
edge 2 0.5000 -0.5000 -0.2500
edge 2 0.5000 0.5000 -0.2500
edge 2 0.5000 -0.5000 0.2500
edge 2 0.5000 0.5000 0.2500
end
```

```
crystal
name alb-4,8-Pbcn
cell 1.3428 3.0082 2.3816 90.000 90.000 90.000
group Pbcn
atom 1 8 0.00000 0.39805 0.25000
edge 1 0.5112 0.3981 -0.0592
edge 1 0.4888 0.6019 0.0592
edge 1 -0.0112 0.1019 0.4408
edge 1 -0.4888 0.3981 -0.0592
edge 1 0.4888 0.3981 0.5592
edge 1 0.0112 0.1019 0.0592
edge 1 -0.4888 0.6019 0.4408
edge 1 -0.5112 0.3981 0.5592
atom 2 4 0.01119 0.10190 0.05916
edge 2 0.5000 0.1019 -0.2500
edge 2 0.0000 0.3981 0.2500
edge 2 0.5000 -0.1019 0.2500
edge 2 -0.5000 0.1019 -0.2500
end
```

```
crystal
name alb-4,8-Pnma
cell 2.7932 2.5698 1.5171 90.000 90.000 90.000
group Pnma
atom 1 4 0.40280 0.61080 0.37470
edge 1 0.5970 0.7500 0.8747
edge 1 0.5970 0.7500 -0.1253
edge 1 0.0970 0.7500 0.6253
edge 1 0.4030 0.2500 0.1253
atom 2 8 0.40300 0.25000 0.12527
edge 2 0.4028 0.6108 0.3747
edge 2 0.0972 0.3892 -0.1253
edge 2 0.5972 0.3892 -0.3747
edge 2 0.5972 0.3892 0.6253
edge 2 0.5972 0.1108 0.6253
edge 2 0.5972 0.1108 -0.3747
edge 2 0.0972 0.1108 -0.1253
edge 2 0.4028 -0.1108 0.3747
end
```

```
crystal
name alb-5,10-P21/c
cell 1.1772 2.4631 1.4581 90.000 94.600 90.000
group P121/c1
atom 1 10 0.00000 0.00000 0.50000
edge 1 -0.4700 -0.1739 0.9697
edge 1 -0.5300 0.3261 0.5303
edge 1 -0.5300 0.1739 0.0303
edge 1 -0.4700 -0.3261 0.4697
edge 1 -0.4700 -0.1739 -0.0303
edge 1 0.4700 0.1739 1.0303
edge 1 0.4700 0.3261 0.5303
edge 1 0.5300 -0.1739 0.9697
edge 1 0.5300 -0.3261 0.4697
edge 1 0.4700 0.1739 0.0303
atom 2 5 0.47000 0.17391 0.03030
edge 2 0.0000 0.0000 -0.5000
edge 2 0.0000 0.5000 0.0000
edge 2 1.0000 0.0000 0.5000
edge 2 1.0000 0.5000 0.0000
edge 2 0.0000 0.0000 0.5000
end
```

```
crystal
name baf-3,3-I4/mmm
cell 5.4314 5.4314 1.8094 90.000 90.000 90.000
group I4/mmm
atom 1 3 0.22222 0.22222 0.00000
edge 1 0.0920 0.0920 0.0000
edge 1 0.2778 0.2778 0.5000
edge 1 0.2778 0.2778 -0.5000
atom 2 3 0.09202 0.09202 0.00000
edge 2 -0.0920 0.0920 0.0000
edge 2 0.0920 -0.0920 0.0000
edge 2 0.2222 0.2222 0.0000
end
```

```
crystal
name baf-3,3-Imma
cell 3.6810 1.8980 5.7158 90.000 90.000 90.000
group Imma
atom 1 3 0.13582 0.25000 0.02764
edge 1 0.1358 0.7500 -0.0276
edge 1 0.1359 0.2500 0.2025
```

```
edge 1 0.1358 -0.2500 -0.0276
atom 2 3 0.13586 0.25000 0.20249
edge 2 0.1358 0.2500 0.0276
edge 2 0.3641 0.2500 0.2975
edge 2 -0.1359 0.2500 0.2025
end
```

```
crystal
name bbe-3,3-Imma
cell 4.9066 2.8871 3.7806 90.000 90.000 90.000
group Imma
atom 1 3 0.31244 0.25000 0.64541
edge 1 0.3981 0.0000 0.5000
edge 1 0.3981 0.5000 0.5000
edge 1 0.1876 0.2500 0.8546
atom 2 3 0.10187 0.50000 0.00000
edge 2 0.1876 0.7500 0.1454
edge 2 0.1876 0.2500 -0.1454
edge 2 -0.1019 0.5000 0.0000
end
```

```
crystal
name bbe-3,4-Cmmm
cell 4.9390 1.8736 1.6579 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 3 0.10121 0.00000 0.00000
edge 1 0.2143 0.0000 -0.5000
edge 1 -0.1012 0.0000 0.0000
edge 1 0.2143 0.0000 0.5000
atom 2 4 0.21429 0.00000 0.50000
edge 2 0.2857 -0.5000 0.5000
edge 2 0.1012 0.0000 1.0000
edge 2 0.1012 0.0000 0.0000
edge 2 0.2857 0.5000 0.5000
end
```

```
crystal
name cbo-e-3,3-Pa-3
cell 3.9997 3.9997 3.9997 90.000 90.000 90.000
group Pa-3
atom 1 3 0.25021 0.29180 0.49493
edge 1 0.4925 0.2520 0.5418
edge 1 0.2520 0.5418 0.4925
edge 1 0.2480 0.0418 0.4925
atom 2 3 0.04180 0.49255 0.24801
edge 2 -0.0051 0.2502 0.2082
edge 2 -0.2082 0.4949 0.2498
edge 2 0.2918 0.4949 0.2502
end
```

```
crystal
name cbs-3,3-C2/m-1
cell 3.7609 3.5607 2.9870 90.000 107.470 90.000
group C12/m1
atom 1 3 0.36060 0.22339 0.44493
edge 1 0.6394 0.2234 0.5551
edge 1 0.1394 0.2766 0.5551
edge 1 0.2759 0.1405 0.1099
atom 2 3 0.27586 0.14045 0.10989
edge 2 0.2759 -0.1405 0.1099
edge 2 0.2241 0.3595 -0.1099
edge 2 0.3606 0.2234 0.4449
end
```

```
crystal
name cbs-3,3-C2/m-2
cell 3.5485 5.7463 2.9122 90.000 109.640 90.000
group C12/m1
atom 1 3 0.05055 0.08696 0.18223
edge 1 0.1204 0.2064 0.4474
edge 1 -0.0505 0.0870 -0.1822
edge 1 0.0505 -0.0870 0.1822
atom 2 3 0.12041 0.20643 0.44737
edge 2 0.3796 0.2936 0.5526
edge 2 0.0505 0.0870 0.1822
edge 2 -0.1204 0.2064 0.5526
end
```

```
crystal
name cbs-3,3-Cmcm
cell 1.8867 5.6623 3.5508 90.000 90.000 90.000
group Cmcm
atom 1 3 0.00000 0.27769 0.01564
edge 1 0.5000 0.2223 -0.0156
edge 1 -0.5000 0.2223 -0.0156
edge 1 0.0000 0.4442 0.1091
atom 2 3 0.00000 0.44417 0.10915
edge 2 0.0000 0.5558 -0.1091
edge 2 0.0000 0.2777 0.0156
edge 2 0.0000 0.4442 0.3909
end
```

```
crystal
name cbs-3,3-Pmna
cell 5.7595 2.8937 3.3559 90.000 90.000 90.000
group Pmna
atom 1 3 0.20661 0.10110 0.12087
edge 1 0.0868 0.3370 0.0493
edge 1 0.2066 -0.1011 -0.1209
edge 1 0.2934 0.1011 0.3791
atom 2 3 0.08678 0.33699 0.04926
edge 2 0.2066 0.1011 0.1209
edge 2 0.0868 0.6630 -0.0493
edge 2 -0.0868 0.3370 0.0493
end
```

```
crystal
name cbs-3,4-Cmma
cell 3.6498 1.9936 3.4209 90.000 90.000 90.000
group Cmma
atom 1 3 0.36287 0.25000 0.41694
edge 1 0.1371 0.2500 0.5831
edge 1 0.2623 0.2500 0.1454
edge 1 0.6371 0.2500 0.4169
atom 2 4 0.26226 0.25000 0.14537
edge 2 0.2377 0.7500 0.1454
edge 2 0.2377 0.2500 -0.1454
edge 2 0.2377 -0.2500 0.1454
edge 2 0.3629 0.2500 0.4169
end
```

```
crystal
name cbs-3,4-Cmmm-1
cell 6.9300 3.7721 1.0007 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 4 0.07205 0.13297 0.00000
edge 1 -0.0720 0.1330 0.0000
edge 1 0.2162 0.1327 0.0000
```

```
edge 1 0.0720 0.1330 1.0000
edge 1 0.0720 0.1330 -1.0000
atom 2 3 0.21622 0.13270 0.00000
edge 2 0.2162 -0.1327 0.0000
edge 2 0.2838 0.3673 0.0000
edge 2 0.0720 0.1330 0.0000
end
```

```
crystal
name cbs-3,4-Cmmm-2
cell 6.5554 1.9216 1.0007 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 3 0.27143 0.00000 0.00000
edge 1 0.2286 -0.5000 0.0000
edge 1 0.4238 0.0000 0.0000
edge 1 0.2286 0.5000 0.0000
atom 2 4 0.42382 0.00000 0.00000
edge 2 0.5762 0.0000 0.0000
edge 2 0.2714 0.0000 0.0000
edge 2 0.4238 0.0000 1.0000
edge 2 0.4238 0.0000 -1.0000
end
```

```
crystal
name cbs-3,4-Fmmm
cell 1.9886 6.8415 3.6645 90.000 90.000 90.000
group Fmmm
atom 1 3 0.00000 0.20925 0.13659
edge 1 0.0000 0.2907 0.3634
edge 1 0.0000 0.2093 -0.1366
edge 1 0.0000 0.0730 0.2345
atom 2 4 0.00000 0.42701 0.26550
edge 2 -0.5000 0.4270 0.2345
edge 2 0.0000 0.5730 0.2655
edge 2 0.0000 0.2907 0.3634
edge 2 0.5000 0.4270 0.2345
end
```

```
crystal
name cbs-3,4-Pmma
cell 3.6949 1.0008 3.4087 90.000 90.000 90.000
group Pmma
atom 1 3 0.11455 0.00000 0.42162
edge 1 0.3854 0.0000 0.4216
edge 1 0.0379 0.0000 0.1406
edge 1 -0.1146 0.0000 0.5784
atom 2 4 0.03792 0.00000 0.14062
edge 2 -0.0379 0.0000 -0.1406
edge 2 0.0379 1.0000 0.1406
edge 2 0.0379 -1.0000 0.1406
edge 2 0.1146 0.0000 0.4216
end
```

```
crystal
name cbs-3,6-Cmcm-1
cell 1.0021 6.7116 2.9542 90.000 90.000 90.000
group Cmcm
atom 1 3 0.00000 0.06546 0.08079
edge 1 0.0000 0.0655 0.4192
edge 1 0.0000 -0.0655 -0.0808
edge 1 0.0000 0.1964 -0.0807
atom 2 6 0.50000 0.30357 0.08067
edge 2 0.5000 0.3036 0.4193
edge 2 1.5000 0.3036 0.0807
```

```
edge 2 -0.5000 0.3036 0.0807
edge 2 0.0000 0.1964 -0.0807
edge 2 1.0000 0.1964 -0.0807
edge 2 0.5000 0.4345 -0.0808
end
```

```
crystal
name cbs-3,6-Cmcm-2
cell 1.0015 6.6567 3.3009 90.000 90.000 90.000
group Cmcm
atom 1 6 0.50000 0.20722 0.09849
edge 1 0.0000 0.2928 -0.0985
edge 1 1.0000 0.2928 -0.0985
edge 1 1.5000 0.2072 0.0985
edge 1 -0.5000 0.2072 0.0985
edge 1 0.5000 0.0571 0.0987
edge 1 0.5000 0.2072 0.4015
atom 2 3 0.50000 0.05706 0.09871
edge 2 0.5000 0.0571 0.4013
edge 2 0.5000 0.2072 0.0985
edge 2 0.5000 -0.0571 -0.0987
end
```

```
crystal
name cbs-3,6-Cmma
cell 2.0089 2.0088 3.9911 90.000 90.000 90.000
group Cmma
atom 1 3 0.24667 0.25000 0.37500
edge 1 -0.2467 0.2500 0.3750
edge 1 0.2533 0.2500 0.6250
edge 1 0.2500 0.2500 0.1250
atom 2 6 0.25000 0.25000 0.12500
edge 2 0.2500 0.7500 0.1250
edge 2 0.2500 -0.2500 0.1250
edge 2 0.7500 0.2500 0.1250
edge 2 0.2467 0.2500 0.3750
edge 2 -0.2500 0.2500 0.1250
edge 2 0.2500 0.2500 -0.1250
end
```

```
crystal
name cbs-3,6-Cmmm-1
cell 1.0036 7.7050 1.0048 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 3 0.00000 0.19427 0.00000
edge 1 -0.5000 0.3057 0.0000
edge 1 0.5000 0.3057 0.0000
edge 1 0.0000 0.0648 0.0000
atom 2 6 0.00000 0.06475 0.00000
edge 2 0.0000 -0.0648 0.0000
edge 2 0.0000 0.1943 0.0000
edge 2 0.0000 0.0648 1.0000
edge 2 0.0000 0.0648 -1.0000
edge 2 1.0000 0.0648 0.0000
edge 2 -1.0000 0.0648 0.0000
end
```

```
crystal
name cbs-3,6-Cmmm-2
cell 6.5927 1.0018 3.3967 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 3 0.42419 0.00000 0.14711
edge 1 0.4242 0.0000 -0.1471
edge 1 0.5758 0.0000 0.1471
```

```
edge 1 0.3154 0.0000 0.3529
atom 2 6 0.31544 0.00000 0.35288
edge 2 0.1846 -0.5000 0.3529
edge 2 0.3154 1.0000 0.3529
edge 2 0.3154 -1.0000 0.3529
edge 2 0.4242 0.0000 0.1471
edge 2 0.3154 0.0000 0.6471
edge 2 0.1846 0.5000 0.3529
end
```

```
crystal
name cbs-4,4-Cmcm
cell 1.9311 6.5283 2.0036 90.000 90.000 90.000
group Cmcm
atom 1 4 0.00000 0.42349 0.00000
edge 1 0.0000 0.4235 0.5000
edge 1 0.0000 0.4235 -0.5000
edge 1 0.0000 0.2704 -0.0016
edge 1 0.0000 0.5765 0.0000
atom 2 4 0.50000 0.22958 0.00156
edge 2 0.5000 0.2296 0.4984
edge 2 0.5000 0.0765 0.0000
edge 2 0.0000 0.2704 -0.0016
edge 2 1.0000 0.2704 -0.0016
end
```

```
crystal
name cbs-4,4-Imma-1
cell 1.9245 2.0028 6.5532 90.000 90.000 90.000
group Imma
atom 1 4 0.00000 0.00140 0.27128
edge 1 -0.5000 0.0014 0.2287
edge 1 0.5000 0.0014 0.2287
edge 1 0.0000 0.4986 0.2713
edge 1 0.0000 0.0000 0.4237
atom 2 4 0.00000 0.00000 0.57625
edge 2 0.0000 -0.5000 0.5763
edge 2 0.0000 0.5000 0.5763
edge 2 0.0000 -0.0014 0.7287
edge 2 0.0000 0.0000 0.4237
end
```

```
crystal
name cbs-4,4-Imma-2
cell 6.7920 1.7133 2.8809 90.000 90.000 90.000
group Imma
atom 1 4 0.22074 0.25000 0.59024
edge 1 0.2207 0.7500 0.4098
edge 1 0.2207 -0.2500 0.4098
edge 1 0.2793 0.2500 0.9098
edge 1 0.0736 0.2500 0.5886
atom 2 4 0.07358 0.25000 0.58862
edge 2 0.0736 0.7500 0.4114
edge 2 -0.0736 0.2500 0.5886
edge 2 0.0736 -0.2500 0.4114
edge 2 0.2207 0.2500 0.5902
end
```

```
crystal
name cbs-4,5-Cmmm
cell 1.9247 6.5602 0.9990 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 5 0.00000 0.22857 0.00000
edge 1 -0.5000 0.2714 0.0000
```



```
edge 1 0.0000 0.0762 0.0000
edge 1 0.0000 0.2286 1.0000
edge 1 0.0000 0.2286 -1.0000
edge 1 0.5000 0.2714 0.0000
atom 2 4 0.00000 0.07619 0.00000
edge 2 0.0000 0.2286 0.0000
edge 2 0.0000 0.0762 1.0000
edge 2 0.0000 0.0762 -1.0000
edge 2 0.0000 -0.0762 0.0000
end
```

```
crystal
name cbs-4,6-Imma
cell 1.0051 2.0125 7.7106 90.000 90.000 90.000
group Imma
atom 1 4 0.00000 0.00000 0.06477
edge 1 0.0000 0.0000 -0.0648
edge 1 0.0000 -0.5000 0.0648
edge 1 0.0000 -0.0040 0.1943
edge 1 0.0000 0.5000 0.0648
atom 2 6 0.00000 0.50397 0.19430
edge 2 -0.5000 0.5040 0.3057
edge 2 0.0000 0.9960 0.1943
edge 2 1.0000 0.5040 0.1943
edge 2 -1.0000 0.5040 0.1943
edge 2 0.5000 0.5040 0.3057
edge 2 0.0000 0.5000 0.0648
end
```

```
crystal
name cbs-4,6-Pmma
cell 1.0019 3.3916 3.1690 90.000 90.000 90.000
group Pmma
atom 1 4 0.25000 0.14739 0.36382
edge 1 -0.2500 0.1474 0.6362
edge 1 0.2500 -0.1474 0.3638
edge 1 0.7500 0.1474 0.6362
edge 1 0.2500 0.3526 0.1362
atom 2 6 0.25000 0.35259 0.13617
edge 2 -0.2500 0.3526 -0.1362
edge 2 1.2500 0.3526 0.1362
edge 2 -0.7500 0.3526 0.1362
edge 2 0.2500 0.6474 0.1362
edge 2 0.7500 0.3526 -0.1362
edge 2 0.2500 0.1474 0.3638
end
```

```
crystal
name cbs-4,6-Pmnm
cell 1.0020 2.9033 3.2600 90.000 90.000 90.000
group Pmnm
atom 1 4 0.75000 0.07765 0.38708
edge 1 0.7500 -0.0776 0.1129
edge 1 0.7500 0.4223 0.3871
edge 1 0.2500 -0.0777 0.6129
edge 1 1.2500 -0.0777 0.6129
atom 2 6 0.25000 0.07764 0.88714
edge 2 0.2500 -0.0777 0.6129
edge 2 0.2500 0.4224 0.8871
edge 2 1.2500 0.0776 0.8871
edge 2 -0.7500 0.0776 0.8871
edge 2 0.7500 -0.0776 1.1129
edge 2 -0.2500 -0.0776 1.1129
end
```

```

crystal
name cbs-4,7-Cmmm
cell 1.0066 7.7154 0.9992 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 7 0.00000 0.19434 0.00000
edge 1 -0.5000 0.3057 0.0000
edge 1 1.0000 0.1943 0.0000
edge 1 -1.0000 0.1943 0.0000
edge 1 0.0000 0.1943 1.0000
edge 1 0.0000 0.1943 -1.0000
edge 1 0.5000 0.3057 0.0000
edge 1 0.0000 0.0648 0.0000
atom 2 4 0.00000 0.06478 0.00000
edge 2 0.0000 -0.0648 0.0000
edge 2 0.0000 0.0648 1.0000
edge 2 0.0000 0.0648 -1.0000
edge 2 0.0000 0.1943 0.0000
end

```

```

crystal
name cbs-4,7-Pmma
cell 1.0056 2.0167 3.7183 90.000 90.000 90.000
group Pmma
atom 1 7 0.25000 0.25000 0.61555
edge 1 -0.2500 0.2500 0.3845
edge 1 0.7500 0.2500 0.3845
edge 1 0.2500 0.7500 0.6155
edge 1 0.2500 -0.2500 0.6155
edge 1 1.2500 0.2500 0.6155
edge 1 -0.7500 0.2500 0.6155
edge 1 0.2500 0.2454 0.8845
atom 2 4 0.75000 0.24538 0.11555
edge 2 1.2500 0.2454 -0.1155
edge 2 0.2500 0.2454 -0.1155
edge 2 0.7500 0.2500 0.3845
edge 2 0.7500 -0.2454 0.1155
end

```

```

crystal
name cbs-4,7-Pmna
cell 1.9906 3.7815 1.0059 90.000 90.000 90.000
group Pmna
atom 1 7 0.00000 0.38641 0.25051
edge 1 -0.5000 0.3864 0.2495
edge 1 0.5000 0.3864 0.2495
edge 1 0.0000 0.1225 0.3127
edge 1 0.0000 0.3864 -0.7495
edge 1 0.0000 0.3864 1.2505
edge 1 0.0000 0.6136 0.7495
edge 1 0.0000 0.6136 -0.2505
atom 2 4 0.00000 0.12254 0.31268
edge 2 -0.5000 0.1225 0.1873
edge 2 0.5000 0.1225 0.1873
edge 2 0.0000 0.3864 0.2505
edge 2 0.0000 -0.1225 0.6873
end

```

```

crystal
name cbs-5,6-Cmmm
cell 1.0066 7.7154 0.9992 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 5 0.00000 0.30567 0.00000
edge 1 -0.5000 0.1943 0.0000

```

```
edge 1 0.0000 0.4352 0.0000
edge 1 0.5000 0.1943 0.0000
edge 1 0.0000 0.3057 1.0000
edge 1 0.0000 0.3057 -1.0000
atom 2 6 0.00000 0.43522 0.00000
edge 2 1.0000 0.4352 0.0000
edge 2 -1.0000 0.4352 0.0000
edge 2 0.0000 0.4352 1.0000
edge 2 0.0000 0.4352 -1.0000
edge 2 0.0000 0.3057 0.0000
edge 2 0.0000 0.5648 0.0000
end
```

```
crystal
name cbs-5,6-Pmma
cell 1.0056 2.0168 3.7185 90.000 90.000 90.000
group Pmma
atom 1 5 0.25000 0.25000 0.61555
edge 1 -0.2500 0.2500 0.3845
edge 1 0.2500 0.7500 0.6155
edge 1 0.2500 -0.2500 0.6155
edge 1 0.2500 0.2547 0.8844
edge 1 0.7500 0.2500 0.3845
atom 2 6 0.75000 0.25468 0.11556
edge 2 1.2500 0.2547 -0.1156
edge 2 0.7500 0.2500 0.3845
edge 2 0.2500 0.2547 -0.1156
edge 2 0.7500 0.7453 0.1156
edge 2 1.7500 0.2547 0.1156
edge 2 -0.2500 0.2547 0.1156
end
```

```
crystal
name cbs-5,6-Pmna
cell 1.9905 3.7818 1.0059 90.000 90.000 90.000
group Pmna
atom 1 5 0.00000 0.38641 0.25054
edge 1 -0.5000 0.3864 0.2495
edge 1 0.0000 0.6136 0.7495
edge 1 0.0000 0.6136 -0.2505
edge 1 0.5000 0.3864 0.2495
edge 1 0.0000 0.1226 0.3133
atom 2 6 0.00000 0.12259 0.31325
edge 2 -0.5000 0.1226 0.1867
edge 2 0.0000 0.1226 -0.6867
edge 2 0.0000 0.1226 1.3133
edge 2 0.0000 -0.1226 0.6867
edge 2 0.5000 0.1226 0.1867
edge 2 0.0000 0.3864 0.2505
end
```

```
crystal
name crb-e-3,4-P41212
cell 3.6047 3.6047 5.5560 90.000 90.000 90.000
group P41212
atom 1 4 0.28228 0.14450 0.06400
edge 1 0.1445 0.2823 -0.0640
edge 1 0.2824 -0.0883 0.1620
edge 1 0.2176 0.4117 0.0880
edge 1 0.4117 0.2176 -0.0880
atom 2 3 0.21760 0.41169 0.08800
edge 2 0.2177 0.6445 0.1860
edge 2 0.2823 0.1445 0.0640
edge 2 0.1445 0.2823 -0.0640
```

end

crystal

name crs-d-3,5-Pnma
cell 3.5401 1.3896 2.7219 90.000 90.000 90.000
group Pnma
atom 1 5 0.10162 0.25000 0.00186
edge 1 0.2258 0.7500 -0.2069
edge 1 0.2258 -0.2500 -0.2069
edge 1 0.2742 0.2500 0.2931
edge 1 -0.1016 -0.2500 -0.0019
edge 1 -0.1016 0.7500 -0.0019
atom 2 3 0.27422 0.25000 0.29309
edge 2 0.3984 0.7500 0.5019
edge 2 0.3984 -0.2500 0.5019
edge 2 0.1016 0.2500 0.0019
end

crystal

name fit-e-4,4-C2/m
cell 3.1823 4.5906 1.7246 90.000 123.090 90.000
group C12/m1
atom 1 4 0.09483 0.18862 0.34552
edge 1 -0.0948 0.1886 0.6545
edge 1 0.0000 0.0000 0.0000
edge 1 0.4052 0.3114 0.6545
edge 1 -0.0948 0.1886 -0.3455
atom 2 4 0.00000 0.00000 0.00000
edge 2 0.0948 -0.1886 0.3455
edge 2 -0.0948 -0.1886 -0.3455
edge 2 -0.0948 0.1886 -0.3455
edge 2 0.0948 0.1886 0.3455
end

crystal

name fry-3,3-C222
cell 5.6927 3.3228 2.9201 90.000 90.000 90.000
group C222
atom 1 3 0.20588 0.11979 0.39633
edge 1 0.2941 0.3802 0.3963
edge 1 0.0858 0.0321 0.1672
edge 1 0.2059 -0.1198 0.6037
atom 2 3 0.08578 0.03211 0.16721
edge 2 -0.0858 -0.0321 0.1672
edge 2 0.2059 0.1198 0.3963
edge 2 0.0858 -0.0321 -0.1672
end

crystal

name fsc-3,4-C2/c
cell 4.1752 2.8145 3.2338 90.000 115.500 90.000
group C12/c1
atom 1 4 0.12531 0.05882 0.56957
edge 1 0.2841 0.3436 0.6579
edge 1 0.2159 -0.1564 0.8421
edge 1 -0.1253 -0.0588 0.4304
edge 1 0.2159 0.1564 0.3421
atom 2 3 0.21592 0.15644 0.34211
edge 2 0.3747 0.4412 0.4304
edge 2 0.1253 -0.0588 0.0696
edge 2 0.1253 0.0588 0.5696
end

crystal

```
name fsc-3,4-I41/amd
cell 1.9542 1.9542 8.8578 90.000 90.000 90.000
group I41/amd
atom 1 4 0.00000 0.25000 0.31854
edge 1 0.5000 0.2500 0.2942
edge 1 0.0000 0.2500 0.4315
edge 1 -0.5000 0.2500 0.2942
edge 1 0.0000 0.2500 0.2058
atom 2 3 0.00000 0.25000 0.20579
edge 2 -0.5000 0.2500 0.1815
edge 2 0.5000 0.2500 0.1815
edge 2 0.0000 0.2500 0.3185
end
```

```
crystal
name fsc-3,4-Iba2
cell 3.6772 2.9225 2.6837 90.000 90.000 90.000
group Iba2
atom 1 4 0.12121 0.07801 0.39286
edge 1 0.2299 0.1880 0.0729
edge 1 -0.1212 -0.0780 0.3929
edge 1 0.2299 -0.1880 0.5729
edge 1 0.2701 0.3120 0.5729
atom 2 3 0.22989 0.18798 0.07295
edge 2 0.1212 0.0780 0.3929
edge 2 0.1212 -0.0780 -0.1071
edge 2 0.3788 0.4220 -0.1071
end
```

```
crystal
name fsc-3,4-Imm2
cell 1.6030 3.8131 2.6322 90.000 90.000 90.000
group Imm2
atom 1 4 0.50000 0.36879 0.28409
edge 1 1.0000 0.2807 0.0964
edge 1 0.5000 0.6312 0.2841
edge 1 0.5000 0.2193 0.5964
edge 1 0.0000 0.2807 0.0964
atom 2 3 0.00000 0.28067 0.09636
edge 2 -0.5000 0.3688 0.2841
edge 2 0.0000 0.1312 -0.2159
edge 2 0.5000 0.3688 0.2841
end
```

```
crystal
name fsc-3,4-Pbca
cell 3.8127 2.8953 2.7189 90.000 90.000 90.000
group Pbca
atom 1 4 0.37752 0.06218 0.49981
edge 1 0.6225 -0.0622 0.5002
edge 1 0.2064 -0.1493 0.6640
edge 1 0.2936 0.3507 0.6640
edge 1 0.2936 0.1493 0.1640
atom 2 3 0.29358 0.14926 0.16400
edge 2 0.1225 -0.0622 -0.0002
edge 2 0.3775 0.4378 -0.0002
edge 2 0.3775 0.0622 0.4998
end
```

```
crystal
name fsc-3,4-Pbcn-1
cell 2.8044 3.0919 3.8761 90.000 90.000 90.000
group Pbcn
atom 1 4 0.06987 0.14654 0.36880
```

```
edge 1 0.1779 -0.1460 0.4458
edge 1 -0.0699 0.1465 0.1312
edge 1 0.3221 0.3540 0.4458
edge 1 -0.1779 0.1460 0.5542
atom 2 3 0.32209 0.35399 0.44584
edge 2 0.4301 0.6465 0.3688
edge 2 0.0699 0.1465 0.3688
edge 2 0.5699 0.3535 0.6312
end
```

```
crystal
name fsc-3,4-Pbcn-2
cell 3.8121 3.0811 2.7397 90.000 90.000 90.000
group Pbcn
atom 1 3 0.22019 0.36399 0.40619
edge 1 0.1312 0.6356 0.2495
edge 1 0.1312 0.3644 0.7495
edge 1 0.3688 0.1356 0.2495
atom 2 4 0.36876 0.13558 0.24946
edge 2 0.2798 -0.1360 0.4062
edge 2 0.2798 0.1360 -0.0938
edge 2 0.2202 0.3640 0.4062
edge 2 0.6312 0.1356 0.2505
end
```

```
crystal
name fsc-3,4-Pbcn-3
cell 3.6563 2.9277 2.6944 90.000 90.000 90.000
group Pbcn
atom 1 3 0.26937 0.31314 0.32051
edge 1 0.3782 0.5782 0.5011
edge 1 0.3782 0.4218 0.0011
edge 1 0.1218 0.0782 0.5011
atom 2 4 0.12181 0.07820 0.50114
edge 2 0.2306 -0.1869 0.3205
edge 2 -0.1218 -0.0782 0.4989
edge 2 0.2306 0.1869 0.8205
edge 2 0.2694 0.3131 0.3205
end
```

```
crystal
name fsc-3,4-Pnma
cell 3.1906 3.8486 2.9766 90.000 90.000 90.000
group Pnma
atom 1 4 0.35194 0.12000 0.36657
edge 1 0.1490 0.0376 0.1337
edge 1 0.3510 -0.0376 0.6337
edge 1 0.3519 0.3800 0.3666
edge 1 0.6490 0.0376 0.3663
atom 2 3 0.14899 0.03757 0.13365
edge 2 0.3519 0.1200 0.3666
edge 2 0.1481 -0.1200 -0.1334
edge 2 -0.1481 0.1200 0.1334
end
```

```
crystal
name fsc-3,5-C2/c
cell 2.6293 3.2019 3.9108 90.000 138.240 90.000
group C12/c1
atom 1 5 0.00665 0.04798 0.12528
edge 1 0.4620 -0.1405 0.3548
edge 1 -0.0066 0.0480 0.3747
edge 1 -0.0066 -0.0480 -0.1253
edge 1 0.0380 0.3595 0.1452
```

```
edge 1 -0.5380 0.1405 -0.1452
atom 2 3 0.03802 0.35950 0.14516
edge 2 0.4934 0.5480 0.3747
edge 2 0.0066 0.0480 0.1253
edge 2 -0.5066 0.4520 -0.1253
end
```

```
crystal
name fsc-3,5-Cmce-1
cell 1.8720 3.0128 3.2274 90.000 90.000 90.000
group Cmca
atom 1 5 0.00000 0.27059 0.05282
edge 1 0.0000 0.4433 -0.2101
edge 1 0.0000 0.5567 0.2101
edge 1 0.5000 0.2294 -0.0528
edge 1 -0.5000 0.2294 -0.0528
edge 1 0.0000 0.0567 0.2899
atom 2 3 0.00000 0.05665 0.28991
edge 2 0.0000 0.2294 0.5528
edge 2 0.0000 -0.2294 0.4472
edge 2 0.0000 0.2706 0.0528
end
```

```
crystal
name fsc-3,5-Cmce-2
cell 1.9581 3.4915 3.1545 90.000 90.000 90.000
group Cmca
atom 1 5 0.00000 0.13353 0.28378
edge 1 -0.5000 0.1335 0.2162
edge 1 0.0000 0.1329 0.6006
edge 1 0.5000 0.1335 0.2162
edge 1 0.0000 0.3671 0.1006
edge 1 0.0000 -0.1329 0.3994
atom 2 3 0.00000 0.36713 0.10057
edge 2 0.0000 0.3665 -0.2162
edge 2 0.0000 0.1335 0.2838
edge 2 0.0000 0.6335 0.2162
end
```

```
crystal
name fsc-3,5-P4/mbm
cell 3.4128 3.4128 1.0016 90.000 90.000 90.000
group P4/mbm
atom 1 3 0.35358 0.14642 0.00000
edge 1 0.6463 0.1463 0.0000
edge 1 0.1463 0.3537 0.0000
edge 1 0.3537 -0.1463 0.0000
atom 2 5 0.14630 0.35370 0.00000
edge 2 -0.1464 0.3536 0.0000
edge 2 0.3536 0.1464 0.0000
edge 2 0.1464 0.6464 0.0000
edge 2 0.1463 0.3537 1.0000
edge 2 0.1463 0.3537 -1.0000
end
```

```
crystal
name fsc-3,5-Pbcm
cell 1.5936 2.9678 1.8998 90.000 90.000 90.000
group Pbcm
atom 1 5 0.60160 0.49987 0.25000
edge 1 0.1033 0.2973 0.2500
edge 1 0.8967 0.7973 0.2500
edge 1 1.1033 0.2973 0.2500
edge 1 0.3984 0.5001 -0.2500
```

```
edge 1 0.3984 0.5001 0.7500
atom 2 3 0.10332 0.29730 0.25000
edge 2 0.6016 0.4999 0.2500
edge 2 0.3984 -0.0001 0.2500
edge 2 -0.3984 0.4999 0.2500
end
```

```
crystal
name fsc-4,5-Cmmm
cell 3.7399 2.5466 1.2743 90.000 90.000 90.000
group Cmmm
atom 1 4 0.25000 0.25000 0.50000
edge 1 0.1340 0.0000 1.0000
edge 1 0.3660 0.5000 1.0000
edge 1 0.3660 0.5000 0.0000
edge 1 0.1340 0.0000 0.0000
atom 2 5 0.13405 0.00000 0.00000
edge 2 0.2500 -0.2500 0.5000
edge 2 0.2500 0.2500 -0.5000
edge 2 0.2500 -0.2500 -0.5000
edge 2 -0.1340 0.0000 0.0000
edge 2 0.2500 0.2500 0.5000
end
```

```
crystal
name fsg-3,3-Fddd
cell 3.4052 1.8119 10.7595 90.000 90.000 90.000
group Fddd
atom 1 3 0.12500 0.12500 0.39464
edge 1 0.1250 0.6250 0.3554
edge 1 0.1250 -0.3750 0.3554
edge 1 0.1250 0.1250 0.4875
atom 2 3 0.12500 0.12500 0.48751
edge 2 -0.1250 -0.1250 0.5125
edge 2 0.1250 0.1250 0.3946
edge 2 0.3750 0.3750 0.5125
end
```

```
crystal
name fsg-3,4-C2/c
cell 3.0982 3.1804 3.7076 90.000 115.680 90.000
group C12/c1
atom 1 4 0.32809 0.25015 0.14980
edge 1 0.3437 0.5400 0.2590
edge 1 0.1719 0.2499 -0.1498
edge 1 0.1563 0.0400 0.2410
edge 1 0.6719 0.2501 0.3502
atom 2 3 0.15631 0.04000 0.24104
edge 2 0.1719 -0.2499 0.3502
edge 2 -0.1563 0.0400 0.2590
edge 2 0.3281 0.2501 0.1498
end
```

```
crystal
name fsx-3,4-C2/c-1
cell 4.2714 1.8628 2.9973 90.000 111.700 90.000
group C12/c1
atom 1 3 0.33561 0.47186 0.17795
edge 1 0.4057 0.1791 -0.0490
edge 1 0.4057 0.8209 0.4510
edge 1 0.0943 0.3209 0.0490
atom 2 4 0.09434 0.32085 0.04899
edge 2 -0.0943 0.6791 -0.0490
edge 2 0.1644 0.0281 -0.1779
```



```
edge 2 0.1644 -0.0281 0.3221
edge 2 0.3356 0.4719 0.1779
end
```

```
crystal
name fsx-3,4-C2/c-2
cell 2.8840 2.5488 4.4599 90.000 110.960 90.000
group C12/c1
atom 1 3 0.17778 0.21408 0.32080
edge 1 -0.0669 -0.0006 0.3799
edge 1 0.4331 0.4994 0.3799
edge 1 0.0669 -0.0006 0.1201
atom 2 4 0.06691 0.00059 0.62010
edge 2 -0.1778 -0.2141 0.6792
edge 2 0.3222 0.2859 0.6792
edge 2 0.1778 -0.2141 0.8208
edge 2 -0.0669 -0.0006 0.3799
end
```

```
crystal
name fsx-3,4-Pccn
cell 1.8685 3.9583 2.9961 90.000 90.000 90.000
group Pccn
atom 1 4 0.06911 0.15639 0.13125
edge 1 0.2222 -0.0852 0.1324
edge 1 0.4309 0.3436 0.1312
edge 1 -0.2778 0.0852 0.3676
edge 1 -0.2222 0.0852 -0.1324
atom 2 3 0.27778 0.58518 0.13245
edge 2 0.4309 0.3436 0.1312
edge 2 -0.0691 0.6564 0.3688
edge 2 0.5691 0.6564 -0.1312
end
```

```
crystal
name fsx-4,5-C2/c
cell 4.6039 1.6038 2.9322 90.000 113.300 90.000
group C12/c1
atom 1 5 0.38146 0.35252 0.17602
edge 1 0.3266 0.8526 -0.0456
edge 1 0.3266 -0.1474 -0.0456
edge 1 0.1734 0.6474 0.0456
edge 1 0.3266 0.1474 0.4544
edge 1 0.6185 0.3525 0.3240
atom 2 4 0.32663 0.14741 0.45443
edge 2 0.3815 0.6475 0.6760
edge 2 0.3815 -0.3525 0.6760
edge 2 0.1185 -0.1475 0.3240
edge 2 0.3815 0.3525 0.1760
end
```

```
crystal
name fsx-4,5-Cmce-1
cell 1.7675 2.7637 4.2850 90.000 90.000 90.000
group Cmca
atom 1 4 0.00000 0.14691 0.32974
edge 1 -0.5000 -0.0006 0.3831
edge 1 0.5000 -0.0006 0.3831
edge 1 0.0000 0.4994 0.3831
edge 1 0.0000 -0.0006 0.1169
atom 2 5 0.00000 0.49944 0.38307
edge 2 0.5000 0.6469 0.3297
edge 2 -0.5000 0.6469 0.3297
edge 2 0.0000 0.5006 0.6169
```

```
edge 2 0.0000 0.1469 0.3297
edge 2 0.0000 0.6469 0.1703
end
```

```
crystal
name fsx-4,5-Cmce-2
cell 1.8742 3.9548 3.1604 90.000 90.000 90.000
group Cmca
atom 1 5 0.00000 0.11529 0.06608
edge 1 -0.5000 0.1865 0.1303
edge 1 0.0000 0.3135 -0.1303
edge 1 0.5000 0.1865 0.1303
edge 1 0.0000 -0.1153 -0.0661
edge 1 0.0000 0.1865 0.3697
atom 2 4 0.00000 0.18649 0.36969
edge 2 -0.5000 0.1153 0.4339
edge 2 0.0000 0.3847 0.5661
edge 2 0.5000 0.1153 0.4339
edge 2 0.0000 0.1153 0.0661
end
```

```
crystal
name fsx-4,5-P21212
cell 4.4001 1.3989 1.3848 90.000 90.000 90.000
group P21212
atom 1 4 0.34045 0.48506 0.25038
edge 1 0.3861 -0.0090 0.7567
edge 1 0.3861 0.9910 -0.2433
edge 1 0.3861 -0.0090 -0.2433
edge 1 0.1139 0.4910 0.2433
atom 2 5 0.11387 0.49102 0.24330
edge 2 0.1596 0.9851 0.7496
edge 2 -0.1139 0.5090 0.2433
edge 2 0.1596 -0.0149 -0.2504
edge 2 0.1596 0.9851 -0.2504
edge 2 0.3404 0.4851 0.2504
end
```

```
crystal
name fsx-4,5-P63/mmc
cell 1.6924 1.6924 4.4278 90.000 90.000 120.000
group P63/mmc
atom 1 4 0.33333 0.66667 0.08860
edge 1 -0.3333 0.3333 0.1369
edge 1 0.6667 1.3333 0.1369
edge 1 0.6667 0.3333 0.1369
edge 1 0.3333 0.6667 -0.1369
atom 2 5 0.66667 0.33333 0.13689
edge 2 1.3333 0.6667 0.0886
edge 2 0.3333 -0.3333 0.0886
edge 2 0.6667 0.3333 0.3631
edge 2 0.3333 0.6667 0.0886
edge 2 0.6667 0.3333 -0.0886
end
```

```
crystal
name fsx-4,5-R-3m
cell 1.6919 1.6919 6.6458 90.000 90.000 120.000
group R-3m
atom 1 5 0.00000 0.00000 0.07537
edge 1 -0.3333 -0.6667 0.1077
edge 1 -0.3333 0.3333 0.1077
edge 1 0.0000 0.0000 -0.0754
edge 1 0.0000 0.0000 0.2256
```

```
edge 1 0.6667 0.3333 0.1077
atom 2 4 0.00000 0.00000 0.22560
edge 2 0.6667 0.3333 0.2580
edge 2 -0.3333 -0.6667 0.2580
edge 2 0.0000 0.0000 0.0754
edge 2 -0.3333 0.3333 0.2580
end
```

```
crystal
name mbc-7,7-P21212
cell 5.2972 1.3079 1.0000 90.000 90.000 90.000
group P21212
atom 1 7 0.67857 0.25000 0.00272
edge 1 0.8214 -0.2500 -0.0027
edge 1 0.8214 0.7500 -0.0027
edge 1 0.5714 0.7500 0.5027
edge 1 0.5714 -0.2500 0.5027
edge 1 0.5714 0.7500 -0.4973
edge 1 0.6786 0.2500 -0.9973
edge 1 0.6786 0.2500 1.0027
atom 2 7 0.42857 0.25000 0.50272
edge 2 0.5714 0.7500 0.5027
edge 2 0.4286 0.2500 -0.4973
edge 2 0.4286 0.2500 1.5027
edge 2 0.3214 0.7500 0.0027
edge 2 0.3214 -0.2500 0.0027
edge 2 0.3214 0.7500 1.0027
edge 2 0.5714 -0.2500 0.5027
end
```

```
crystal
name mbc-9,9-Pca21
cell 6.2924 1.0000 1.0000 90.000 90.000 90.000
group Pca21
atom 1 9 0.31881 0.50495 0.13834
edge 1 0.4312 0.0050 0.6383
edge 1 0.3188 -0.4951 0.1383
edge 1 0.3188 1.5049 0.1383
edge 1 0.4312 1.0050 0.6383
edge 1 0.4312 1.0050 -0.3617
edge 1 0.1812 0.5049 -0.3617
edge 1 0.1812 0.5049 0.6383
edge 1 0.3188 0.5049 -0.8617
edge 1 0.3188 0.5049 1.1383
atom 2 9 0.06881 0.00496 0.13835
edge 2 0.1812 0.5049 -0.3617
edge 2 0.0688 0.0050 -0.8617
edge 2 0.0688 0.0050 1.1383
edge 2 0.1812 -0.4951 -0.3617
edge 2 -0.0688 -0.0050 -0.3617
edge 2 -0.0688 -0.0050 0.6383
edge 2 0.1812 -0.4951 0.6383
edge 2 0.0688 -0.9950 0.1383
edge 2 0.0688 1.0050 0.1383
end
```

```
crystal
name mbc-3,6-I4122
cell 2.3707 2.3707 2.1514 90.000 90.000 90.000
group I4122
atom 1 6 0.50000 0.50000 0.00000
edge 1 0.2942 0.2058 -0.2500
edge 1 0.7058 0.7942 -0.2500
edge 1 0.7942 0.7058 0.2500
```

```
edge 1 0.7942 0.7942 0.0000
edge 1 0.2058 0.2058 0.0000
edge 1 0.2058 0.2942 0.2500
atom 2 3 0.20583 0.29417 0.25000
edge 2 0.0000 0.0000 0.5000
edge 2 0.5000 0.0000 0.2500
edge 2 0.5000 0.5000 0.0000
end
```

```
crystal
name mog-e-x-z-4,4-I4/mmm
cell 3.2693 3.2693 2.0770 90.000 90.000 90.000
group I4/mmm
atom 1 4 0.00000 0.50000 0.00000
edge 1 0.0000 0.5000 -0.5000
edge 1 0.0000 0.8170 0.0000
edge 1 0.0000 0.1830 0.0000
edge 1 0.0000 0.5000 0.5000
atom 2 4 0.00000 0.18300 0.00000
edge 2 -0.1830 0.0000 0.0000
edge 2 0.0000 0.5000 0.0000
edge 2 0.1830 0.0000 0.0000
edge 2 0.0000 -0.1830 0.0000
end
```

```
crystal
name nbo-x-d-4,4-C2/m
cell 4.3160 3.3240 2.2552 90.000 136.700 90.000
group C12/m1
atom 1 4 0.12328 0.34974 0.32337
edge 1 0.3767 0.1503 0.6766
edge 1 0.1233 0.6503 0.3234
edge 1 -0.1233 0.3497 -0.3234
edge 1 0.0000 0.5000 0.5000
atom 2 4 0.00000 0.50000 0.50000
edge 2 0.1233 0.6503 0.3234
edge 2 -0.1233 0.6503 0.6766
edge 2 -0.1233 0.3497 0.6766
edge 2 0.1233 0.3497 0.3234
end
```

```
crystal
name nbo-x-d-4,4-I41/amd
cell 4.4842 4.4842 3.5399 90.000 90.000 90.000
group I41/amd
atom 1 4 0.00000 0.75000 0.12500
edge 1 -0.1822 0.7500 0.1283
edge 1 0.1822 0.7500 0.1283
edge 1 0.0000 0.9322 0.1217
edge 1 0.0000 0.5678 0.1217
atom 2 4 0.00000 0.56780 0.12173
edge 2 0.0000 0.7500 0.1250
edge 2 0.0000 0.4322 -0.1217
edge 2 0.1822 0.7500 0.1283
edge 2 -0.1822 0.7500 0.1283
end
```

```
crystal
name nia-4,4-Pbca
cell 2.3860 2.7640 3.0561 90.000 90.000 90.000
group Pbca
atom 1 4 0.04331 0.39729 0.12891
edge 1 0.1988 0.6015 0.3707
edge 1 0.3012 0.3985 -0.1293
```

```
edge 1 -0.1988 0.1015 0.1293
edge 1 -0.3012 0.6015 0.1293
atom 2 4 0.30123 0.10146 0.37072
edge 2 0.4567 -0.1027 0.1289
edge 2 0.0433 0.1027 0.6289
edge 2 0.5433 0.3973 0.3711
edge 2 -0.0433 -0.1027 0.3711
end
```

```
crystal
name nia-5,5-P21/c
cell 1.6594 2.4073 2.6632 90.000 115.590 90.000
group P121/c1
atom 1 5 0.30686 0.27789 0.44292
edge 1 0.3072 -0.0569 0.2206
edge 1 0.6928 0.0569 0.7794
edge 1 -0.3072 0.4431 0.2794
edge 1 0.6928 0.4431 0.2794
edge 1 0.3072 0.5569 0.7206
atom 2 5 0.69280 0.44308 0.27944
edge 2 0.6931 0.7779 0.0571
edge 2 0.3069 0.2221 -0.0571
edge 2 1.3069 0.2779 0.4429
edge 2 0.3069 0.2779 0.4429
edge 2 0.6931 0.7221 0.5571
end
```

```
crystal
name seh-3,5-Cmc21
cell 1.7306 3.6065 1.6661 90.000 90.000 90.000
group Cmc21
atom 1 3 0.00000 0.19221 0.29599
edge 1 -0.5000 0.0772 0.4635
edge 1 0.0000 0.4228 -0.0365
edge 1 0.5000 0.0772 0.4635
atom 2 5 0.50000 0.07718 0.46345
edge 2 1.0000 0.1922 0.2960
edge 2 0.5000 0.3078 0.7960
edge 2 0.0000 0.1922 0.2960
edge 2 0.5000 -0.0772 -0.0365
edge 2 0.5000 -0.0772 0.9635
end
```

```
crystal
name seh-3,5-P21/c
cell 1.9967 1.7103 3.4572 90.000 114.030 90.000
group P121/c1
atom 1 3 0.13031 0.36739 0.39949
edge 1 0.3568 0.3652 0.7159
edge 1 0.3568 0.1348 0.2159
edge 1 -0.3568 0.6348 0.2841
atom 2 5 0.35675 0.13478 0.21590
edge 2 0.6432 -0.3652 0.2841
edge 2 0.6432 0.6348 0.2841
edge 2 0.1303 0.1326 -0.1005
edge 2 0.1303 0.3674 0.3995
edge 2 -0.1303 -0.1326 0.1005
end
```

```
crystal
name seh-3,5-P43212
cell 2.9291 2.9291 1.8248 90.000 90.000 90.000
group P43212
atom 1 3 0.29117 0.29117 0.00000
```

```
edge 1 0.5496 0.4504 0.2500
edge 1 0.0496 0.0496 0.0000
edge 1 0.4504 0.5496 -0.2500
atom 2 5 0.04956 0.04956 0.00000
edge 2 -0.2088 0.2088 0.2500
edge 2 0.2912 0.2912 0.0000
edge 2 0.2088 -0.2088 -0.2500
edge 2 -0.0496 -0.0496 0.5000
edge 2 -0.0496 -0.0496 -0.5000
end
```

```
crystal
name seh-3,5-Pbca
cell 3.6495 1.7014 3.4734 90.000 90.000 90.000
group Pbca
atom 1 5 0.17739 0.13117 0.36897
edge 1 -0.0667 -0.1348 0.3680
edge 1 0.3226 -0.3688 0.3690
edge 1 0.3226 0.6312 0.3690
edge 1 0.0667 0.3652 0.1320
edge 1 0.0667 0.1348 0.6320
atom 2 3 0.06667 0.36515 0.13204
edge 2 -0.1774 0.6312 0.1310
edge 2 0.1774 0.1312 0.3690
edge 2 0.1774 0.3688 -0.1310
end
```

```
crystal
name seh-3,5-Pna21
cell 1.9195 3.0433 1.5502 90.000 90.000 90.000
group Pna21
atom 1 5 0.13541 0.79572 0.30209
edge 1 0.6354 0.7043 0.3021
edge 1 -0.3646 0.7043 0.3021
edge 1 0.3653 0.6237 -0.1693
edge 1 0.1347 1.1237 0.3307
edge 1 -0.1347 0.8763 0.8307
atom 2 3 0.13469 0.12371 0.33066
edge 2 0.3646 0.2957 0.8021
edge 2 0.1354 -0.2043 0.3021
edge 2 -0.1354 0.2043 -0.1979
end
```

```
crystal
name seh-4,6-Imma
cell 1.9962 2.4532 2.4520 90.000 90.000 90.000
group Imma
atom 1 6 0.25000 0.25000 0.75000
edge 1 -0.2500 0.2500 0.7500
edge 1 0.0000 0.5000 1.0000
edge 1 0.5000 0.5000 0.5000
edge 1 0.5000 0.0000 0.5000
edge 1 0.0000 0.0000 1.0000
edge 1 0.7500 0.2500 0.7500
atom 2 4 0.00000 0.00000 0.00000
edge 2 -0.2500 0.2500 -0.2500
edge 2 -0.2500 -0.2500 0.2500
edge 2 0.2500 -0.2500 0.2500
edge 2 0.2500 0.2500 -0.2500
end
```

```
crystal
name seh-4,6-P21/c-1
cell 1.7805 1.7862 3.4155 90.000 108.840 90.000
```

```

group P121/c1
atom 1 6 0.37621 0.09348 0.20206
edge 1 0.6238 -0.4065 0.2979
edge 1 0.6238 0.5935 0.2979
edge 1 0.1835 0.0931 -0.1074
edge 1 -0.1835 -0.0931 0.1074
edge 1 0.1835 0.4069 0.3926
edge 1 0.8165 -0.0931 0.1074
atom 2 4 0.18349 0.40686 0.39263
edge 2 0.3762 0.4065 0.7021
edge 2 -0.3762 0.5935 0.2979
edge 2 0.3762 0.0935 0.2021
edge 2 0.6238 0.5935 0.2979
end

crystal
name seh-4,6-P21/c-2
cell 1.6920 2.9674 1.9824 90.000 104.960 90.000
group P121/c1
atom 1 4 0.22953 0.38759 0.19109
edge 1 -0.2340 0.2751 -0.1916
edge 1 0.2340 0.7249 0.1916
edge 1 -0.2340 0.2249 0.3084
edge 1 0.7660 0.2249 0.3084
atom 2 6 0.23403 0.72487 0.19156
edge 2 -0.2295 0.6124 -0.1911
edge 2 0.2340 0.7751 -0.3084
edge 2 0.2340 0.7751 0.6916
edge 2 0.2295 0.3876 0.1911
edge 2 -0.2295 0.8876 0.3089
edge 2 0.7705 0.8876 0.3089
end

crystal
name seh-4,6-P21/c-3
cell 1.7810 3.2315 1.9075 90.000 110.540 90.000
group P121/c1
atom 1 6 0.78565 0.20199 0.09265
edge 1 0.7855 -0.1075 0.0941
edge 1 1.2145 0.3925 0.4059
edge 1 0.2145 0.1075 -0.0941
edge 1 0.7857 0.2980 -0.4074
edge 1 0.7857 0.2980 0.5926
edge 1 1.2145 0.1075 -0.0941
atom 2 4 0.21448 0.39245 0.40594
edge 2 0.2143 0.7020 0.4074
edge 2 -0.2143 0.2020 0.0926
edge 2 0.7857 0.2980 0.5926
edge 2 -0.2143 0.2980 0.5926
end

crystal
name seh-5,7-P21/c
cell 1.7000 1.8980 3.0380 90.000 117.750 90.000
group P121/c1
atom 1 5 0.24217 0.28035 0.42973
edge 1 -0.3960 0.4332 0.2656
edge 1 0.6040 0.4332 0.2656
edge 1 0.3960 -0.0668 0.2344
edge 1 0.6040 0.0668 0.7656
edge 1 0.3960 0.5668 0.7344
atom 2 7 0.60405 0.43323 0.26559
edge 2 1.2422 0.2803 0.4297
edge 2 0.3960 -0.0668 0.2344

```

```
edge 2 0.3960 0.9332 0.2344
edge 2 0.2422 0.2803 0.4297
edge 2 0.7578 0.7803 0.0703
edge 2 0.2422 0.2197 -0.0703
edge 2 0.7578 0.7197 0.5703
end
```

```
crystal
name sqc502-3,5-P43212
cell 3.0286 3.0286 3.4734 90.000 90.000 90.000
group P43212
atom 1 3 0.35392 0.25181 0.20588
edge 1 0.5979 0.4437 0.1084
edge 1 0.0979 0.0563 0.1416
edge 1 0.5563 0.4021 0.3916
atom 2 5 0.09789 0.05631 0.14156
edge 2 0.0563 0.0979 -0.1416
edge 2 -0.1461 0.2482 0.0441
edge 2 0.3539 0.2518 0.2059
edge 2 -0.0563 -0.0979 0.3584
edge 2 0.2482 -0.1461 -0.0441
end
```

```
crystal
name sqc502-4,5-P42/mmm
cell 2.3549 2.3549 2.2039 90.000 90.000 90.000
group P42/mmm
atom 1 4 0.23966 0.23966 0.50000
edge 1 0.5000 0.5000 0.7262
edge 1 0.0000 0.0000 0.7738
edge 1 0.0000 0.0000 0.2262
edge 1 0.5000 0.5000 0.2738
atom 2 5 0.00000 0.00000 0.22619
edge 2 -0.2603 0.2603 0.0000
edge 2 -0.2397 -0.2397 0.5000
edge 2 0.0000 0.0000 -0.2262
edge 2 0.2397 0.2397 0.5000
edge 2 0.2603 -0.2603 0.0000
end
```

```
crystal
name sta-4,4-Cccm
cell 1.6327 2.8278 3.4655 90.000 90.000 90.000
group Cccm
atom 1 4 0.00000 0.00000 0.00000
edge 1 0.2500 -0.2500 -0.1667
edge 1 -0.2500 0.2500 -0.1667
edge 1 -0.2500 0.2500 0.1667
edge 1 0.2500 -0.2500 0.1667
atom 2 4 0.25000 0.25000 0.33333
edge 2 -0.2500 0.2500 0.1667
edge 2 0.5000 0.5000 0.5000
edge 2 0.0000 0.0000 0.5000
edge 2 0.7500 0.2500 0.1667
end
```

```
crystal
name stb-4,4-P2/c
cell 1.7832 1.8325 3.8506 90.000 142.750 90.000
group P12/c1
atom 1 4 0.26598 0.29749 0.05201
edge 1 -0.2660 0.7025 -0.0520
edge 1 0.7340 0.2975 0.4480
edge 1 0.0000 -0.0018 -0.2500
```



```
edge 1 1.0000 0.0018 0.2500
atom 2 4 0.00000 0.00177 0.25000
edge 2 -0.7340 0.2975 0.0520
edge 2 -0.2660 -0.2975 -0.0520
edge 2 0.2660 -0.2975 0.5520
edge 2 0.7340 0.2975 0.4480
end
```

```
crystal
name stb-5,6-C2/m
cell 4.0879 1.3626 1.7868 90.000 138.340 90.000
group C12/m1
atom 1 5 0.22426 0.50000 0.15718
edge 1 0.0000 1.0000 0.0000
edge 1 0.0000 0.0000 0.0000
edge 1 0.5000 0.5000 1.0000
edge 1 0.2757 0.0000 -0.1572
edge 1 0.2757 1.0000 -0.1572
atom 2 6 0.00000 0.00000 0.00000
edge 2 -0.2757 0.0000 -0.8428
edge 2 0.2243 -0.5000 0.1572
edge 2 -0.2243 -0.5000 -0.1572
edge 2 -0.2243 0.5000 -0.1572
edge 2 0.2243 0.5000 0.1572
edge 2 0.2757 0.0000 0.8428
end
```

```
crystal
name stc-4,6-P-3m1
cell 1.5222 1.5222 2.4321 90.000 90.000 120.000
group P-3m1
atom 1 4 0.00000 0.00000 0.29394
edge 1 -0.3333 -0.6667 0.0980
edge 1 -0.3333 0.3333 0.0980
edge 1 0.6667 0.3333 0.0980
edge 1 0.0000 0.0000 0.7061
atom 2 6 0.66667 0.33333 0.09797
edge 2 1.0000 1.0000 0.2939
edge 2 1.0000 0.0000 0.2939
edge 2 0.3333 0.6667 -0.0980
edge 2 1.3333 0.6667 -0.0980
edge 2 0.3333 -0.3333 -0.0980
edge 2 0.0000 0.0000 0.2939
end
```

```
crystal
name stc-4,6-R-3m
cell 1.5223 1.5223 7.2953 90.000 90.000 120.000
group R-3m
atom 1 4 0.00000 0.00000 0.06870
edge 1 -0.3333 -0.6667 0.1340
edge 1 -0.3333 0.3333 0.1340
edge 1 0.6667 0.3333 0.1340
edge 1 0.0000 0.0000 -0.0687
atom 2 6 0.00000 0.00000 0.19932
edge 2 0.6667 0.3333 0.2646
edge 2 -0.3333 -0.6667 0.2646
edge 2 -0.3333 -0.6667 0.1340
edge 2 0.6667 0.3333 0.1340
edge 2 -0.3333 0.3333 0.1340
edge 2 -0.3333 0.3333 0.2646
end
```

```
crystal
```

```

name stc-5,6-C2/m-1
cell 4.6721 1.3749 2.6246 90.000 149.470 90.000
group C12/ml
atom 1 5 0.18021 0.00000 0.01630
edge 1 -0.1066 -0.5000 -0.3279
edge 1 0.3934 0.0000 0.6721
edge 1 -0.1066 0.5000 -0.3279
edge 1 0.3198 0.5000 -0.0163
edge 1 0.3198 -0.5000 -0.0163
atom 2 6 0.10660 0.50000 0.32791
edge 2 -0.1802 1.0000 -0.0163
edge 2 -0.1066 0.5000 -0.3279
edge 2 0.3934 0.0000 0.6721
edge 2 0.3934 1.0000 0.6721
edge 2 0.3198 0.5000 0.9837
edge 2 -0.1802 0.0000 -0.0163
end

```

```

crystal
name stc-5,6-C2/m-2
cell 4.9693 1.3731 2.3852 90.000 148.250 90.000
group C12/ml
atom 1 6 0.36270 0.50000 0.11071
edge 1 0.2209 1.0000 -0.4023
edge 1 0.7209 0.5000 0.5977
edge 1 0.6373 0.5000 0.8893
edge 1 0.2209 0.0000 -0.4023
edge 1 0.1373 0.0000 -0.1107
edge 1 0.1373 1.0000 -0.1107
atom 2 5 0.22090 0.00000 0.59769
edge 2 0.3627 -0.5000 1.1107
edge 2 -0.1373 0.0000 0.1107
edge 2 0.2791 0.5000 0.4023
edge 2 0.2791 -0.5000 0.4023
edge 2 0.3627 0.5000 1.1107
end

```

```

crystal
name tcj-9,9-Pna21
cell 1.9823 1.0000 3.2217 90.000 90.000 90.000
group Pna21
atom 1 9 0.48758 0.31644 0.20690
edge 1 0.4876 -0.6836 0.2069
edge 1 0.4876 1.3164 0.2069
edge 1 0.9876 0.1836 0.2069
edge 1 -0.0124 0.1836 0.2069
edge 1 0.2331 0.3164 0.4749
edge 1 0.2669 -0.1836 -0.0251
edge 1 0.2669 0.8164 -0.0251
edge 1 0.7669 0.6836 -0.0251
edge 1 0.7331 0.1836 0.4749
atom 2 9 0.23309 0.31644 0.47486
edge 2 0.7331 0.1836 0.4749
edge 2 -0.2669 0.1836 0.4749
edge 2 0.4876 0.3164 0.2069
edge 2 0.2331 -0.6836 0.4749
edge 2 0.2331 1.3164 0.4749
edge 2 0.0124 0.8164 0.7069
edge 2 0.0124 -0.1836 0.7069
edge 2 0.5124 0.6836 0.7069
edge 2 -0.0124 0.1836 0.2069
end

```

```

crystal

```

```

name tcm-9,9-P21/c
cell 3.3653 1.0000 1.9825 90.000 106.820 90.000
group P121/c1
atom 1 9 0.38402 0.18392 0.30345
edge 1 0.3840 -0.8161 0.3034
edge 1 0.3840 1.1839 0.3034
edge 1 0.6160 -0.1839 0.6966
edge 1 0.1160 0.3161 0.4174
edge 1 0.1160 0.1839 -0.0826
edge 1 0.3840 0.3161 -0.1966
edge 1 0.3840 0.3161 0.8034
edge 1 0.6160 -0.3161 0.1966
edge 1 0.6160 0.6839 0.1966
atom 2 9 0.11598 0.31611 0.41737
edge 2 0.3840 0.1839 0.3034
edge 2 0.3840 0.3161 0.8034
edge 2 0.1160 0.1839 -0.0826
edge 2 0.1160 0.1839 0.9174
edge 2 -0.1160 0.6839 0.5826
edge 2 0.1160 -0.6839 0.4174
edge 2 0.1160 1.3161 0.4174
edge 2 -0.1160 -0.1839 0.0826
edge 2 -0.1160 0.8161 0.0826
end

```

```

crystal
name tco-9,9-Pna21
cell 3.8213 1.0000 1.6743 90.000 90.000 90.000
group Pna21
atom 1 9 0.27901 0.09633 0.27669
edge 1 0.0290 0.2500 0.1259
edge 1 0.2210 0.5963 -0.2233
edge 1 0.2210 -0.4037 0.7767
edge 1 0.5290 0.2500 0.1259
edge 1 0.2210 -0.4037 -0.2233
edge 1 0.2210 0.5963 0.7767
edge 1 0.2790 -0.9037 0.2767
edge 1 0.2790 1.0963 0.2767
edge 1 0.4710 -0.2500 0.6259
atom 2 9 0.02901 0.25000 0.12589
edge 2 -0.0290 0.7500 -0.3741
edge 2 -0.0290 0.7500 0.6259
edge 2 0.2790 0.0963 0.2767
edge 2 -0.2210 0.4037 0.2767
edge 2 0.0290 -0.7500 0.1259
edge 2 0.0290 1.2500 0.1259
edge 2 -0.0290 -0.2500 -0.3741
edge 2 -0.0290 -0.2500 0.6259
edge 2 0.2210 0.5963 -0.2233
end

```