

The atomic coordinates are given bellow in Angstroms for the 2x2 unit cell investigated. For each adsorbed C₂H_x structure, the first 22 atoms listed are Pt; the next two atoms are carbon and are followed by the corresponding number of hydrogens atoms. The raw DFT internal energies per 2x2 unit cell (i.e. per C₂H_x molecule) are given in eV and Hartrees.

C₂H₆ gas

TOTAL ENERGY IS -409.4644101 eV (-15.049 hartree)
 C -0.1472238224E-02 0.4073977902E-04 0.1208677139E-01
 C 0.1533429748E-02 -0.6254373728E-04 0.1522823702E+01
 H 0.1012230464E+01 -0.9870244963E-03 -0.3947225902E+00
 H -0.5094992283E+00 -0.8784745479E+00 -0.3926366669E+00
 H -0.5092836082E+00 0.8787602562E+00 -0.3928358505E+00
 H 0.5104871667E+00 -0.8805020443E+00 0.1921247360E+01
 H 0.5105776940E+00 0.8800411024E+00 0.1921524657E+01
 H -0.1014593224E+01 0.1184309247E-02 0.1922512927E+01

C₂H₄ gas

TOTAL ENERGY IS -375.9202422 eV (-13.816 hartree)
 C 0.8044958526E+00 0.2929977235E+01 0.1882706616E+02
 C -0.5086673471E+00 0.2929977987E+01 0.1891398758E+02
 H 0.1366468784E+01 0.3853693230E+01 0.1875169331E+02
 H 0.1381586903E+01 0.2013504725E+01 0.1881730126E+02
 H -0.1077884437E+01 0.3852226566E+01 0.1891786759E+02
 H -0.1081807578E+01 0.2013742241E+01 0.1898706693E+02

The clean Pt₁₁₀ surface, with no adsobates:

TOTAL ENERGY IS -15885.6311791 eV (-583.7841 hartree)
 Pt .1986250000E+01 .1404500000E+01 .9832000000E+01
 Pt .1986250000E+01 .4213500000E+01 .9832000000E+01
 Pt .5958750000E+01 .1404500000E+01 .9832000000E+01
 Pt .5958750000E+01 .4213500000E+01 .9832000000E+01
 Pt .0000000000E+00 .0000000000E+00 .1123659952E+02
 Pt .0000000000E+00 .2809000000E+01 .1123659952E+02
 Pt .3972500000E+01 .0000000000E+00 .1123659952E+02
 Pt .3972500000E+01 .2809000000E+01 .1123659952E+02
 Pt .2055053700E+01 .1404500000E+01 .1264178896E+02
 Pt .2055053700E+01 .4213500000E+01 .1264178896E+02
 Pt .5889946300E+01 .1404500000E+01 .1264178896E+02
 Pt .5889946300E+01 .4213500000E+01 .1264178896E+02
 Pt -.2561205792E-03 -.1157519547E-03 .1394209653E+02
 Pt -.2560970977E-03 .2809115984E+01 .1394203147E+02
 Pt .3972829189E+01 -.1237964693E-03 .1422609024E+02
 Pt .3972829242E+01 .2809124411E+01 .1422609159E+02
 Pt .1999415098E+01 .1404512572E+01 .1545911537E+02
 Pt .1999126895E+01 .4213487961E+01 .1545853893E+02
 Pt .5945594231E+01 .1404512176E+01 .1545896383E+02
 Pt .5945896013E+01 .4213487645E+01 .1545862295E+02
 Pt -.2248541173E-03 -.3623529009E-04 .1664961084E+02
 Pt -.2247902645E-03 .2809032929E+01 .1664963552E+02

H adsorbed on Pt{110}

TOTAL ENERGY IS -15902.15281 eV (-584.435 hartree)
 Pt .1986250000E+01 .1404500000E+01 .9832000000E+01
 Pt .1986250000E+01 .4213500000E+01 .9832000000E+01
 Pt .5958750000E+01 .1404500000E+01 .9832000000E+01
 Pt .5958750000E+01 .4213500000E+01 .9832000000E+01
 Pt .0000000000E+00 .0000000000E+00 .1123659952E+02
 Pt .0000000000E+00 .2809000000E+01 .1123659952E+02
 Pt .3972500000E+01 .0000000000E+00 .1123659952E+02
 Pt .3972500000E+01 .2809000000E+01 .1123659952E+02
 Pt .2055053700E+01 .1404500000E+01 .1264178896E+02
 Pt .2055053700E+01 .4213500000E+01 .1264178896E+02
 Pt .5889946300E+01 .1404500000E+01 .1264178896E+02
 Pt .5889946300E+01 .4213500000E+01 .1264178896E+02
 Pt -.5090383577E-03 -.2095349696E-02 .1395683417E+02
 Pt -.1021475300E-02 .2810750846E+01 .1395709109E+02
 Pt .3973982593E+01 -.1146151612E-02 .1422196624E+02
 Pt .3974099869E+01 .2809653759E+01 .1422302665E+02
 Pt .1977410438E+01 .1405008275E+01 .1542587670E+02
 Pt .1975209961E+01 .4213687313E+01 .1544499871E+02
 Pt .5968150907E+01 .1403993991E+01 .1542769315E+02
 Pt .5970544992E+01 .4213113287E+01 .1544709439E+02
 Pt -.1474563986E-02 -.8996448480E-02 .1672872319E+02
 Pt -.1307879145E-02 .2816549865E+01 .1672931793E+02
 H .3845118712E-03 .1404088791E+01 .1776697054E+02

C2HX adsorbed on Pt110

1. Species: Ethyl (C2H5) adsorbed on Pt110 The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1: ethyl staggered at a surface atop site; most stable

TOTAL ENERGY IS -16279.0159390 eV (-598.2407 hartree)
 Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt -0.6344276566E-02 -0.1244911770E-02 0.1400968034E+02
 Pt -0.2948714721E-02 0.2805893421E+01 0.1395147699E+02
 Pt 0.3939795126E+01 -0.6146961539E-02 0.1423233348E+02
 Pt 0.3953250266E+01 0.2802826209E+01 0.1423707989E+02
 Pt 0.1938209790E+01 0.1386588811E+01 0.1547368374E+02
 Pt 0.1936769622E+01 0.4215993684E+01 0.1547365085E+02
 Pt 0.5950123510E+01 0.1390768833E+01 0.1543847645E+02
 Pt 0.5951727517E+01 0.4212192321E+01 0.1543766030E+02
 Pt -0.9531792432E-01 -0.9330348593E-02 0.1685431091E+02

Pt -0.2644913868E-01 0.2798754684E+01 0.1668266723E+02
 C -0.8615999411E+00 -0.6568161468E-01 0.1879601987E+02
 C 0.1637824801E+00 0.7995755626E-01 0.1988183522E+02
 H -0.1386342681E+01 -0.1022411399E+01 0.1884345918E+02
 H -0.1605349212E+01 0.7347490054E+00 0.1881733706E+02
 H 0.1012011650E+01 -0.5943096128E+00 0.1975504683E+02
 H 0.5480180083E+00 0.1097991123E+01 0.1996518229E+02
 H -0.2975615228E+00 -0.1822575580E+00 0.2084386617E+02

geometry 2: ethyl elongated C-H bond, at a bridge ridge site; second most stable

TOTAL ENERGY IS -16278.8584753 eV (-598.2349 hartree)

Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt -0.6394572197E-03 0.2082833338E-01 0.1400264760E+02
 Pt -0.5969277161E-02 0.2837369619E+01 0.1397849260E+02
 Pt 0.3990205607E+01 0.3124321791E-01 0.1419876255E+02
 Pt 0.3990291296E+01 0.2848079568E+01 0.1423191122E+02
 Pt 0.2015454394E+01 0.1443669819E+01 0.1542059316E+02
 Pt 0.1995038970E+01 0.4276793528E+01 0.1544000979E+02
 Pt 0.5955760047E+01 0.1442678630E+01 0.1543519373E+02
 Pt 0.5979908514E+01 0.4289705592E+01 0.1544809893E+02
 Pt 0.4079005887E-01 0.1253835588E+00 0.1679378976E+02
 Pt 0.7680595279E-03 0.2885144783E+01 0.1667213097E+02
 C 0.2300497342E+00 0.1176457521E+01 0.1857472177E+02
 C 0.1578990460E+01 0.1191101346E+01 0.1923607269E+02
 H -0.5764205843E+00 0.7654192926E+00 0.1919209997E+02
 H -0.1315591416E+00 0.2272900243E+01 0.1847516286E+02
 H 0.2386799164E+01 0.1323924754E+01 0.1851702879E+02
 H 0.1639399791E+01 0.2025666486E+01 0.1994331480E+02
 H 0.1774343337E+01 0.2727366653E+00 0.1979278377E+02

2. Species: Ethene (H₂C-CH₂) adsorbed on Pt110. The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1:

TOTAL ENERGY IS -16263.1204643 eV (-597.6565 hartree)

Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02

Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt -0.5368389747E-02 0.2687059924E-02 0.1397639635E+02
 Pt -0.5387310158E-02 0.2812582251E+01 0.1397240662E+02
 Pt 0.3960356049E+01 0.1210478001E-01 0.1418998753E+02
 Pt 0.3959721470E+01 0.2830072639E+01 0.1419257065E+02
 Pt 0.1981925827E+01 0.1434546139E+01 0.1540646870E+02
 Pt 0.1961503588E+01 0.4247001709E+01 0.1543421589E+02
 Pt 0.5930906436E+01 0.1438214109E+01 0.1540396917E+02
 Pt 0.5956189950E+01 0.4249892433E+01 0.1542772871E+02
 Pt -0.1496441938E-01 0.1052863375E+00 0.1672981404E+02
 Pt -0.1585928757E-01 0.2846845179E+01 0.1670237052E+02
 C -0.2358633226E-01 0.8262971288E+00 0.1869592841E+02
 C -0.2238999544E-01 0.2288281237E+01 0.1869571361E+02
 H 0.8896193448E+00 0.3625465398E+00 0.1907225652E+02
 H -0.9300161756E+00 0.3595013157E+00 0.1908314960E+02
 H 0.8886405293E+00 0.2755893922E+01 0.1907022183E+02
 H -0.9256591315E+00 0.2760967423E+01 0.1908198465E+02

geometry 2:

TOTAL ENERGY IS -16262.9803681 eV (-597.6514 hartree)

Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.3920209464E-02 0.9628146383E-02 0.1392652911E+02
 Pt 0.2445463442E-02 0.2822131880E+01 0.1402194113E+02
 Pt 0.3976383507E+01 0.2347281168E-01 0.1417381312E+02
 Pt 0.3978111540E+01 0.2835455805E+01 0.1421751514E+02
 Pt 0.2015794741E+01 0.1431653510E+01 0.1542317142E+02
 Pt 0.2017225674E+01 0.4254944880E+01 0.1542235904E+02
 Pt 0.5943629572E+01 0.1432944877E+01 0.1543155166E+02
 Pt 0.5942112606E+01 0.4252168563E+01 0.1543150879E+02
 Pt 0.8432431932E-02 0.4392859762E-01 0.1660682226E+02
 Pt 0.1700300278E-01 0.2854356975E+01 0.1672396344E+02
 C 0.8349217116E+00 0.2923554960E+01 0.1870295917E+02
 C -0.5594089139E+00 0.2923539581E+01 0.1879699164E+02
 H 0.1388610399E+01 0.3848960850E+01 0.1881101814E+02
 H 0.1409816716E+01 0.2023536973E+01 0.1887742659E+02
 H -0.1088903657E+01 0.3851360138E+01 0.1897795781E+02
 H -0.1100844091E+01 0.2022169012E+01 0.1904862691E+02

geometry 3:

TOTAL ENERGY IS -16262.8441370 eV (-597.6464 hartree)

Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01

Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt -0.7514214682E-02 0.1141262470E-01 0.1393115313E+02
 Pt -0.7873929430E-02 0.2820166588E+01 0.1403600922E+02
 Pt 0.3968303098E+01 0.2185000191E-01 0.1417887257E+02
 Pt 0.3968308313E+01 0.2829149182E+01 0.1421627047E+02
 Pt 0.1995362398E+01 0.1430999386E+01 0.1542934481E+02
 Pt 0.1995632358E+01 0.4248173923E+01 0.1542595993E+02
 Pt 0.5933385731E+01 0.1429489113E+01 0.1543008536E+02
 Pt 0.5930232654E+01 0.4248510166E+01 0.1542830142E+02
 Pt -0.9892020374E-02 0.4114055144E-01 0.1661739984E+02
 Pt -0.1255826135E-01 0.2851137207E+01 0.1676041299E+02
 C -0.2619447053E-01 0.2246671828E+01 0.1882441254E+02
 C -0.2545942900E-01 0.3645421482E+01 0.1878077614E+02
 H 0.8939499060E+00 0.1718267486E+01 0.1904127510E+02
 H -0.9415655235E+00 0.1712244117E+01 0.1904460394E+02
 H 0.8961957009E+00 0.4184099928E+01 0.1896821412E+02
 H -0.9404446255E+00 0.4192114070E+01 0.1897300502E+02

geometry 4:

TOTAL ENERGY IS -16262.8081044 eV (-597.6450 hartree)

Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.2964378887E-01 0.4607995962E-01 0.1394039013E+02
 Pt 0.2841455698E-01 0.2840557098E+01 0.1396192240E+02
 Pt 0.3967813451E+01 0.8301248210E-01 0.1421280150E+02
 Pt 0.3981934360E+01 0.2881594037E+01 0.1421102050E+02
 Pt 0.2093919562E+01 0.1501631019E+01 0.1563145135E+02
 Pt 0.1996568436E+01 0.4319274834E+01 0.1541421959E+02
 Pt 0.5976136592E+01 0.1489343539E+01 0.1543062710E+02
 Pt 0.5973448780E+01 0.4266741742E+01 0.1543545081E+02
 Pt -0.3256640336E-01 0.5303667678E-01 0.1662602958E+02
 Pt 0.5520349885E-01 0.2869579409E+01 0.1672687254E+02
 C 0.2627319158E+01 0.1920536396E+01 0.1763499931E+02
 C 0.1467753838E+01 0.2552946079E+01 0.1826354748E+02
 H 0.3502865649E+01 0.2558368666E+01 0.1752730779E+02
 H 0.2885617263E+01 0.9314700592E+00 0.1801153314E+02
 H 0.1638805907E+01 0.3563240200E+01 0.1863743381E+02

H 0.9220127985E+00 0.1933358316E+01 0.1897783456E+02

geometry 5:

TOTAL ENERGY IS -16262.7572654 eV (-597.6432 hartree)
 Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.8220329512E-01 0.2039833233E-02 0.1395891933E+02
 Pt 0.3636249796E-01 0.2811088584E+01 0.1392870146E+02
 Pt 0.3905080232E+01 0.1095699778E-01 0.1419833152E+02
 Pt 0.3927243134E+01 0.2816237457E+01 0.1416907371E+02
 Pt 0.2097962284E+01 0.1458818741E+01 0.1571591209E+02
 Pt 0.2091689330E+01 0.4213667792E+01 0.1569028115E+02
 Pt 0.5878588784E+01 0.1402845364E+01 0.1541760990E+02
 Pt 0.5875628659E+01 0.4229667464E+01 0.1541567706E+02
 Pt -0.6247911752E-01 0.7411121256E-02 0.1659130594E+02
 Pt -0.9890877461E-01 0.2820533993E+01 0.1656990392E+02
 C 0.2905909485E+01 0.2137161027E+01 0.1754787593E+02
 C 0.2901772388E+01 0.3607560259E+01 0.1753882430E+02
 H 0.3897121846E+01 0.1680197744E+01 0.1754714487E+02
 H 0.2246535224E+01 0.1689007435E+01 0.1829208958E+02
 H 0.3888961715E+01 0.4070773400E+01 0.1753001150E+02
 H 0.2237074554E+01 0.4058071322E+01 0.1827558037E+02

geometry 6:

TOTAL ENERGY IS -16262.6186572 eV (-597.6381 hartree)
 Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.3443270013E-02 0.2437557058E-01 0.1396005135E+02
 Pt 0.2718114185E-02 0.2798021386E+01 0.1396166709E+02
 Pt 0.3967437222E+01 0.2287975587E-02 0.1415247353E+02
 Pt 0.3967317955E+01 0.2830494738E+01 0.1415477637E+02
 Pt 0.2132706508E+01 0.1415126599E+01 0.1557127150E+02
 Pt 0.2003364551E+01 0.4229576969E+01 0.1542295694E+02
 Pt 0.5799141334E+01 0.1416787692E+01 0.1557452074E+02
 Pt 0.5932007465E+01 0.4231524780E+01 0.1542037757E+02
 Pt -0.9216831962E-02 0.1630731434E-01 0.1658970506E+02

Pt -0.9120832318E-02 0.2822489876E+01 0.1658917986E+02
 C 0.4695990782E+01 0.1423860661E+01 0.1735342381E+02
 C 0.3231741692E+01 0.1423085136E+01 0.1735144598E+02
 H 0.5101979899E+01 0.2329936209E+01 0.1780146335E+02
 H 0.5109472491E+01 0.5354209738E+00 0.1782698493E+02
 H 0.2819985941E+01 0.2328863279E+01 0.1779487431E+02
 H 0.2814783783E+01 0.5342963113E+00 0.1782138789E+02

geometry 7:

TOTAL ENERGY IS -16262.3258511 eV (-597.6273 hartree)
 Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.8446648096E-02 0.3145685506E-01 0.1395392679E+02
 Pt 0.1360856061E-01 0.2788163065E+01 0.1395763118E+02
 Pt 0.3867969179E+01 0.2139957166E-01 0.1418931029E+02
 Pt 0.3867813613E+01 0.2811623664E+01 0.1419574075E+02
 Pt 0.2002423219E+01 0.1422948104E+01 0.1582569833E+02
 Pt 0.1866890116E+01 0.4236219106E+01 0.1541890800E+02
 Pt 0.5821437823E+01 0.1419778848E+01 0.1540913030E+02
 Pt 0.5806226603E+01 0.4232260610E+01 0.1541591485E+02
 Pt -0.1992962408E+00 -0.1122341075E-02 0.1662346611E+02
 Pt -0.2035407333E+00 0.2852119219E+01 0.1662230827E+02
 C 0.2784899220E+01 0.7538049026E+00 0.1773700864E+02
 C 0.2783240209E+01 0.2147582110E+01 0.1772604952E+02
 H 0.3699551908E+01 0.2063024465E+00 0.1754462732E+02
 H 0.2021885510E+01 0.2170492114E+00 0.1828934182E+02
 H 0.3696255140E+01 0.2693700481E+01 0.1752387509E+02
 H 0.2018738357E+01 0.2691625461E+01 0.1826889028E+02

geometry 8:

TOTAL ENERGY IS -16262.2668894 eV (-597.6251 hartree)
 Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.3263279961E-01 0.1638596681E-01 0.1394374114E+02
 Pt 0.3448836475E-01 0.2802747506E+01 0.1394827151E+02
 Pt 0.3937124360E+01 0.1445931306E-01 0.1417751769E+02

Pt 0.3938100734E+01 0.2825174223E+01 0.1417705616E+02
 Pt 0.2088385464E+01 0.1423406151E+01 0.1570160115E+02
 Pt 0.1973845304E+01 0.4233235540E+01 0.1544262479E+02
 Pt 0.5921280004E+01 0.1431834311E+01 0.1539222682E+02
 Pt 0.5895132454E+01 0.4236237991E+01 0.1543059908E+02
 Pt -0.9726222149E-01 -0.1030961683E-01 0.1662107506E+02
 Pt -0.9353663237E-01 0.2865802548E+01 0.1662910265E+02
 C 0.3354593011E+01 0.1407328414E+01 0.1741929429E+02
 C 0.2075461640E+01 0.1512837616E+01 0.1796812797E+02
 H 0.3996680528E+01 0.2280018305E+01 0.1736616767E+02
 H 0.3870566208E+01 0.4549284459E+00 0.1744147162E+02
 H 0.1714333905E+01 0.2466664670E+01 0.1834245275E+02
 H 0.1607218343E+01 0.6413267571E+00 0.1841489770E+02

geometry 9:

TOTAL ENERGY IS -16260.4326750 eV (-597.5577 hartree)
 Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt -0.3586978223E-02 -0.1224709653E-01 0.1389625942E+02
 Pt -0.2528466814E-02 0.2825355215E+01 0.1389890147E+02
 Pt 0.3969723715E+01 0.3615585634E-01 0.1538734644E+02
 Pt 0.3968193580E+01 0.2784903262E+01 0.1539554372E+02
 Pt 0.1737141457E+01 0.1407588049E+01 0.1534701577E+02
 Pt 0.1780037240E+01 0.4217726387E+01 0.1538604633E+02
 Pt 0.6197997458E+01 0.1409826972E+01 0.1534439557E+02
 Pt 0.6155096553E+01 0.4217424288E+01 0.1537876338E+02
 Pt -0.1013408114E-01 -0.3084483812E-02 0.1685693514E+02
 Pt -0.8629011086E-02 0.2816833132E+01 0.1685943193E+02
 C 0.3970872456E+01 0.6681056075E+00 0.1737793548E+02
 C 0.3972150390E+01 0.2145170669E+01 0.1738217632E+02
 H 0.4876459131E+01 0.2182900912E+00 0.1777778444E+02
 H 0.3060134113E+01 0.2231841379E+00 0.1776804849E+02
 H 0.4879425781E+01 0.2591508820E+01 0.1778252196E+02
 H 0.3062819620E+01 0.2589838016E+01 0.1777825413E+02

3. Species: Ethylidene (HC-CH₃) adsorbed on Pt110. The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1:

TOTAL ENERGY IS -16262.8953759 eV (-597.6482 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01

Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt -0.5646082274E-02 0.1940051051E-02 0.1398899057E+02
 Pt -0.5214689500E-02 0.2822084638E+01 0.1398937690E+02
 Pt 0.3961714134E+01 0.7833934359E-02 0.1422163439E+02
 Pt 0.3960698971E+01 0.2825726589E+01 0.1422575515E+02
 Pt 0.1969077125E+01 0.1421902102E+01 0.1540469065E+02
 Pt 0.1962698104E+01 0.4234088245E+01 0.1544963336E+02
 Pt 0.5954836021E+01 0.1424803159E+01 0.1542293194E+02
 Pt 0.5969335914E+01 0.4233089943E+01 0.1545628528E+02
 Pt -0.5684170033E-02 0.5425578346E-01 0.1678691760E+02
 Pt 0.1002479454E-02 0.2824120892E+01 0.1678711858E+02
 C 0.6627354566E-01 0.1445168660E+01 0.1829190185E+02
 C 0.1247479840E+01 0.1445382226E+01 0.1919141680E+02
 H -0.9019140530E+00 0.1456387346E+01 0.1880731907E+02
 H 0.2187833158E+01 0.1487125337E+01 0.1864693561E+02
 H 0.1204291766E+01 0.2302492655E+01 0.1987266582E+02
 H 0.1245368667E+01 0.5470151177E+00 0.1981644127E+02

geometry 2:

TOTAL ENERGY IS -16262.4323206 eV (-597.6312 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt -0.3252119274E-02 0.2125980397E-01 0.1395169908E+02
 Pt -0.3176007588E-02 0.2766171426E+01 0.1394802442E+02
 Pt 0.3995361306E+01 -0.4173308439E-01 0.1413312353E+02
 Pt 0.3996235516E+01 0.2792903077E+01 0.1414057617E+02
 Pt 0.2316330865E+01 0.1366758026E+01 0.1574977542E+02
 Pt 0.2020920702E+01 0.4180514513E+01 0.1542965970E+02
 Pt 0.5661891405E+01 0.1377205522E+01 0.1578189424E+02
 Pt 0.5956251797E+01 0.4180377432E+01 0.1544877492E+02
 Pt 0.2002110316E-01 0.2384504585E-02 0.1656310539E+02
 Pt 0.2349542108E-01 0.2725505998E+01 0.1655690939E+02
 C 0.3975985300E+01 0.1381640826E+01 0.1699177816E+02
 C 0.3981889196E+01 0.2709325346E+00 0.1799138436E+02
 H 0.3951031884E+01 0.2388418216E+01 0.1741390432E+02
 H 0.3000039482E+01 -0.2023456713E+00 0.1807914454E+02
 H 0.4680140856E+01 -0.5217645104E+00 0.1771623120E+02
 H 0.4264574226E+01 0.6426731184E+00 0.1898095835E+02

geometry 3:

TOTAL ENERGY IS -16262.4126271 eV (-597.6305 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.1621046064E-01 -0.3441623422E-01 0.1395188704E+02
 Pt 0.1869883193E-01 0.2752616990E+01 0.1396665928E+02
 Pt 0.3964305433E+01 -0.7298605083E-01 0.1421502152E+02
 Pt 0.3979077078E+01 0.2722334983E+01 0.1422196099E+02
 Pt 0.2072376633E+01 0.1267716248E+01 0.1560031219E+02
 Pt 0.1991665209E+01 0.4126760881E+01 0.1540535920E+02
 Pt 0.5967158738E+01 0.1289825739E+01 0.1543734294E+02
 Pt 0.5977404156E+01 0.4064331382E+01 0.1542682955E+02
 Pt -0.6886378434E-01 -0.2082681435E+00 0.1666767428E+02
 Pt 0.9169953406E-01 0.2651830823E+01 0.1674207575E+02
 C 0.1807975687E+01 0.1836838587E+01 0.1755850563E+02
 C 0.1689469963E+01 0.8496575314E+00 0.1866090413E+02
 H 0.2572191453E+01 0.2590156298E+01 0.1776404583E+02
 H 0.9029544270E+00 0.6947801897E-01 0.1851221203E+02
 H 0.2635082146E+01 0.3186897765E+00 0.1880387009E+02
 H 0.1431981263E+01 0.1351256001E+01 0.1959874072E+02

geometry 4:

TOTAL ENERGY IS -16262.3774965 eV (-597.6292 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt -0.1142923201E+00 0.5261976211E-02 0.1397444723E+02
 Pt -0.5388516555E-01 0.2813874272E+01 0.1394798816E+02
 Pt 0.4045000240E+01 0.1833321979E-01 0.1421753895E+02
 Pt 0.4020058691E+01 0.2830256112E+01 0.1412212868E+02
 Pt 0.2043882829E+01 0.1432853497E+01 0.1538791802E+02
 Pt 0.2041951974E+01 0.4248761853E+01 0.1538869739E+02
 Pt 0.5825207689E+01 0.1475933156E+01 0.1573162832E+02
 Pt 0.5838311939E+01 0.4213258536E+01 0.1573617573E+02
 Pt 0.5314148146E-01 0.3547971738E-01 0.1660738276E+02
 Pt 0.1020854580E+00 0.2839898157E+01 0.1660526302E+02
 C 0.5030907174E+01 0.2851003581E+01 0.1704828957E+02

C 0.5425639290E+01 0.2812936515E+01 0.1847617324E+02
H 0.3941814744E+01 0.2881244914E+01 0.1692537448E+02
H 0.6490076158E+01 0.2607711947E+01 0.1863680137E+02
H 0.5191864599E+01 0.3766597879E+01 0.1896511304E+02
H 0.4850753319E+01 0.2037084617E+01 0.1899647288E+02

geometry 5:

TOTAL ENERGY IS -16262.3560963 eV (-597.6284 hartree)
Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
Pt 0.1597536335E-01 0.1295405654E-01 0.1394591845E+02
Pt 0.1172213359E-01 0.2795564868E+01 0.1397101741E+02
Pt 0.4005646827E+01 0.1850959901E-01 0.1420169095E+02
Pt 0.4023505946E+01 0.2813177015E+01 0.1420747065E+02
Pt 0.2115711740E+01 0.1407085595E+01 0.1556195711E+02
Pt 0.2023420532E+01 0.4253073636E+01 0.1536775131E+02
Pt 0.5997844490E+01 0.1401885574E+01 0.1547576790E+02
Pt 0.6005097539E+01 0.4164938479E+01 0.1546581825E+02
Pt -0.2656142472E-02 -0.5851681754E-01 0.1665452699E+02
Pt 0.1554442877E+00 0.2773852728E+01 0.1676394094E+02
C 0.2028757583E+01 0.2186283242E+01 0.1745879138E+02
C 0.2289255406E+01 0.1334085662E+01 0.1864261684E+02
H 0.2679802465E+01 0.3068337347E+01 0.1748379318E+02
H 0.1718910145E+01 0.4027681391E+00 0.1867276999E+02
H 0.3358071763E+01 0.1082807595E+01 0.1865057756E+02
H 0.2094565009E+01 0.1896388984E+01 0.1956163813E+02

geometry 6:

TOTAL ENERGY IS -16262.2399648 eV (-597.6242 hartree)
Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
Pt 0.2037857800E-01 -0.4023722553E-01 0.1394398218E+02
Pt 0.2618731994E-01 0.2800159659E+01 0.1397615561E+02
Pt 0.3917542256E+01 -0.9830517682E-01 0.1422822826E+02
Pt 0.3947768143E+01 0.2741090816E+01 0.1421943202E+02
Pt 0.1968844570E+01 0.1284984758E+01 0.1541107675E+02

Pt 0.2105852677E+01 0.4101849217E+01 0.1576415032E+02
 Pt 0.5946022116E+01 0.1361509616E+01 0.1541986052E+02
 Pt 0.5938561887E+01 0.4137912837E+01 0.1543805404E+02
 Pt -0.7574753411E-01 -0.4511165040E-01 0.1663042960E+02
 Pt 0.3502957411E-01 0.2723402462E+01 0.1672784495E+02
 C 0.1736756106E+01 0.3369893177E+01 0.1768594288E+02
 C 0.2660043899E+01 0.2406436291E+01 0.1837294300E+02
 H 0.1492195986E+01 0.4228687432E+01 0.1831775054E+02
 H 0.2132951941E+01 0.1484356514E+01 0.1864123145E+02
 H 0.3506227459E+01 0.2103164441E+01 0.1775216776E+02
 H 0.3046941552E+01 0.2839469409E+01 0.1929936164E+02

geometry 7:

TOTAL ENERGY IS -16262.1282587 eV (-597.6201 hartree)

Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.6258130854E-02 -0.6132456991E-03 0.1395277246E+02
 Pt 0.9086569587E-02 0.2806889745E+01 0.1402948315E+02
 Pt 0.4004244848E+01 -0.9444534409E-02 0.1421509027E+02
 Pt 0.4014103475E+01 0.2798494584E+01 0.1425007747E+02
 Pt 0.2014154502E+01 0.1378239750E+01 0.1542529461E+02
 Pt 0.2001859584E+01 0.4200033179E+01 0.1542436718E+02
 Pt 0.6024386941E+01 0.1401134798E+01 0.1546177390E+02
 Pt 0.6012074915E+01 0.4216940179E+01 0.1545293481E+02
 Pt 0.4263783293E-01 -0.1061282319E-01 0.1672148955E+02
 Pt 0.6842523407E-01 0.2780451613E+01 0.1684219737E+02
 C 0.4386619441E+00 0.3115091715E+01 0.1866805629E+02
 C 0.1684160990E+01 0.2911379876E+01 0.1940633835E+02
 H -0.4030848688E+00 0.3472352794E+01 0.1926889227E+02
 H 0.2560253321E+01 0.2761451207E+01 0.1878110441E+02
 H 0.1861161216E+01 0.3737471087E+01 0.2010653084E+02
 H 0.1563969979E+01 0.2022111083E+01 0.2004312650E+02

geometry 8:

TOTAL ENERGY IS -16262.0711914 eV (-597.6180 hartree)

Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02

Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt -0.1298803572E-02 -0.1012841129E-01 0.1402184528E+02
 Pt -0.2930484551E-02 0.2799341243E+01 0.1393765432E+02
 Pt 0.3974575750E+01 -0.1773436928E-01 0.1423711341E+02
 Pt 0.3979025450E+01 0.2789363366E+01 0.1421437332E+02
 Pt 0.1971694984E+01 0.1357489611E+01 0.1544815053E+02
 Pt 0.1992663642E+01 0.4175341184E+01 0.1544064917E+02
 Pt 0.5958699233E+01 0.1389989095E+01 0.1543735959E+02
 Pt 0.5969969671E+01 0.4193939571E+01 0.1544249579E+02
 Pt -0.1376002748E-01 -0.4516722340E-01 0.1681699909E+02
 Pt 0.1070684318E-01 0.2771814271E+01 0.1665432131E+02
 C -0.3143477195E+00 -0.3932833774E-01 0.1867907146E+02
 C 0.9476856750E-01 -0.1007973822E+01 0.1969920628E+02
 H -0.9225103561E+00 0.7966067839E+00 0.1903241143E+02
 H -0.5681035506E+00 -0.1883174477E+01 0.1964135767E+02
 H 0.1101872790E+01 -0.1392860132E+01 0.1953673754E+02
 H 0.4987366080E-02 -0.6000940254E+00 0.2070989703E+02

geometry 9:

TOTAL ENERGY IS -16261.6819871 eV (-597.6037 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt -0.3869014641E-01 -0.1014589733E+00 0.1395738430E+02
 Pt -0.3557427777E-01 0.2739535860E+01 0.1395539245E+02
 Pt 0.3970595063E+01 -0.1113486483E+00 0.1414396019E+02
 Pt 0.3951260842E+01 0.2689781942E+01 0.1442779101E+02
 Pt 0.1916231426E+01 0.1217186141E+01 0.1540706219E+02
 Pt 0.1901046887E+01 0.4106504100E+01 0.1542241687E+02
 Pt 0.6020842206E+01 0.1190130622E+01 0.1541966986E+02
 Pt 0.5940232947E+01 0.4074361631E+01 0.1561451961E+02
 Pt -0.1422841104E-02 -0.1631843302E+00 0.1675129790E+02
 Pt 0.1414371061E-01 0.2624541085E+01 0.1671218796E+02
 C 0.4256224382E+01 0.3319235540E+01 0.1642650497E+02
 C 0.4167355847E+01 0.2282021725E+01 0.1747565399E+02
 H 0.3646328990E+01 0.4210623564E+01 0.1667665053E+02
 H 0.3174033354E+01 0.1799043885E+01 0.1743862151E+02
 H 0.4906903643E+01 0.1470394683E+01 0.1735880043E+02
 H 0.4296527543E+01 0.2727085951E+01 0.1846533623E+02

geometry 10:

TOTAL ENERGY IS -16261.6458469 eV (-597.6023 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02

Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.4425263881E-01 0.7471460119E-02 0.1394912604E+02
 Pt 0.4497978463E-01 0.2803032843E+01 0.1394792912E+02
 Pt 0.3967845211E+01 -0.4282287245E-02 0.1418266742E+02
 Pt 0.3959491453E+01 0.2799929628E+01 0.1418285969E+02
 Pt 0.2086510088E+01 0.1405039023E+01 0.1566455618E+02
 Pt 0.2026410175E+01 0.4210374390E+01 0.1546997826E+02
 Pt 0.5954062574E+01 0.1391927327E+01 0.1541144008E+02
 Pt 0.5913560066E+01 0.4195930222E+01 0.1541620697E+02
 Pt -0.4828720951E-01 -0.4592719391E-01 0.1661617699E+02
 Pt -0.5669411559E-01 0.2837754762E+01 0.1661961193E+02
 C 0.2616296863E+01 0.1365954304E+01 0.1748528170E+02
 C 0.3961912447E+01 0.1257272328E+01 0.1800510250E+02
 H 0.1818543103E+01 0.1439412369E+01 0.1822497575E+02
 H 0.4745735752E+01 0.1240369521E+01 0.1723045850E+02
 H 0.4173554555E+01 0.2083687927E+01 0.1869635210E+02
 H 0.4061329510E+01 0.3437210255E+00 0.1860610429E+02

4. Species: Ethylidyne (C-CH₃) adsorbed on Pt110. The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1:

TOTAL ENERGY IS -16246.6684703 eV (-597.0519 hartree)
 Pt 0.1986249785E+01 0.1404500202E+01 0.9832001396E+01
 Pt 0.1986249785E+01 0.4213500112E+01 0.9832001396E+01
 Pt 0.5958751486E+01 0.1404500202E+01 0.9832001396E+01
 Pt 0.5958751486E+01 0.4213500112E+01 0.9832001396E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660031E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000410E+01 0.1123660031E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123660031E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000410E+01 0.1123660031E+02
 Pt 0.2034794069E+01 0.1409050771E+01 0.1263333468E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209511276E+01 0.1263254822E+02
 Pt 0.5910206487E+01 0.1409050771E+01 0.1263333468E+02
 Pt 0.5910522825E+01 0.4209511276E+01 0.1263254822E+02
 Pt 0.2798105032E-01 0.7432987133E-02 0.1398307987E+02
 Pt 0.2755030558E-01 0.2798965216E+01 0.1398626352E+02
 Pt 0.3957767751E+01 0.6979514844E-02 0.1422120136E+02
 Pt 0.3958040060E+01 0.2800045026E+01 0.1422512183E+02
 Pt 0.2101326923E+01 0.1401598723E+01 0.1561509703E+02
 Pt 0.2006066580E+01 0.4210740765E+01 0.1543059730E+02
 Pt 0.5974841752E+01 0.1403016285E+01 0.1541855373E+02
 Pt 0.6010804002E+01 0.4212718911E+01 0.1541626950E+02
 Pt 0.4176609173E-01 -0.1979242270E-01 0.1678413065E+02
 Pt 0.4234637424E-01 0.2824619261E+01 0.1678469595E+02
 C 0.1281412788E+01 0.1402518636E+01 0.1747356315E+02
 C 0.1997235053E+01 0.1407894557E+01 0.1876134300E+02
 H 0.3075940852E+01 0.1492064182E+01 0.1860965849E+02

H 0.1680462771E+01 0.2251099208E+01 0.1938398062E+02
 H 0.1801758251E+01 0.4926252085E+00 0.1933003644E+02

geometry 2:

TOTAL ENERGY IS -16246.5990811 eV (-597.0494 hartree)
 Pt 0.1986249785E+01 0.1404500202E+01 0.9832001396E+01
 Pt 0.1986249785E+01 0.4213500112E+01 0.9832001396E+01
 Pt 0.5958751486E+01 0.1404500202E+01 0.9832001396E+01
 Pt 0.5958751486E+01 0.4213500112E+01 0.9832001396E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660031E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000410E+01 0.1123660031E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123660031E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000410E+01 0.1123660031E+02
 Pt 0.2034794069E+01 0.1409050771E+01 0.1263333468E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209511276E+01 0.1263254822E+02
 Pt 0.5910206487E+01 0.1409050771E+01 0.1263333468E+02
 Pt 0.5910522825E+01 0.4209511276E+01 0.1263254822E+02
 Pt 0.6874532093E-01 -0.7754353829E-02 0.1398228204E+02
 Pt 0.3217883540E-01 0.2806013836E+01 0.1396758144E+02
 Pt 0.3902208794E+01 -0.1308010604E-01 0.1421343266E+02
 Pt 0.3954376224E+01 0.2798413709E+01 0.1417922624E+02
 Pt 0.2077856150E+01 0.1381754359E+01 0.1567223818E+02
 Pt 0.2095731267E+01 0.4199216905E+01 0.1570485336E+02
 Pt 0.5926113909E+01 0.1380653874E+01 0.1542006421E+02
 Pt 0.5921853882E+01 0.4188765199E+01 0.1542186200E+02
 Pt -0.9225072991E-01 -0.3236220119E-01 0.1666038425E+02
 Pt -0.6401951409E-01 0.2786023646E+01 0.1671963846E+02
 C 0.1905083131E+01 0.2773731841E+01 0.1713542823E+02
 C 0.2556745703E+01 0.2740874328E+01 0.1845487449E+02
 H 0.3645499038E+01 0.2795944583E+01 0.1836298877E+02
 H 0.2230038270E+01 0.3579271887E+01 0.1907605196E+02
 H 0.2309128661E+01 0.1819232974E+01 0.1898887075E+02

geometry 3:

TOTAL ENERGY IS -16246.3611051 eV (-597.0406 hartree)
 Pt 0.1986249809E+01 0.1404500242E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.1986249809E+01 0.4213500225E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.5958751549E+01 0.1404500242E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.5958751549E+01 0.4213500225E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660056E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000483E+01 0.1123660056E+02
 Pt 0.3972500079E+01 0.0000000000E+00 0.1123660056E+02
 Pt 0.3972500079E+01 0.2809000483E+01 0.1123660056E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050810E+01 0.1263333497E+02
 Pt 0.2034476341E+01 0.4209511389E+01 0.1263254851E+02
 Pt 0.5910206551E+01 0.1409050810E+01 0.1263333497E+02
 Pt 0.5910522889E+01 0.4209511389E+01 0.1263254851E+02
 Pt 0.1222086867E-01 -0.2249368236E-01 0.1401252675E+02
 Pt 0.1149416791E-01 0.2796354989E+01 0.1400666046E+02
 Pt 0.3964618818E+01 -0.3238352094E-01 0.1423645471E+02
 Pt 0.3966059988E+01 0.2792576239E+01 0.1423883165E+02
 Pt 0.1983798735E+01 0.1376746289E+01 0.1542770198E+02
 Pt 0.1947626534E+01 0.4190679825E+01 0.1548889504E+02
 Pt 0.5977225232E+01 0.1375159259E+01 0.1542282373E+02
 Pt 0.6020629835E+01 0.4191778150E+01 0.1548335629E+02
 Pt 0.3072138635E-01 0.6978690627E-02 0.1690002528E+02

Pt 0.1975012813E-01 0.2788451576E+01 0.1685004334E+02
 C 0.1947937850E+00 0.1424561829E+01 0.1819353807E+02
 C 0.4097004698E+00 0.1540838389E+01 0.1963392010E+02
 H 0.1328230357E+01 0.2101378061E+01 0.1983875285E+02
 H -0.4041423162E+00 0.2114230230E+01 0.2009103230E+02
 H 0.4768788869E+00 0.5764653935E+00 0.2014438547E+02

geometry 4:

TOTAL ENERGY IS -16246.2548455 eV (-597.0367 hartree)

Pt 0.1986249809E+01 0.1404500242E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.1986249809E+01 0.4213500225E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.5958751549E+01 0.1404500242E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.5958751549E+01 0.4213500225E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660056E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000483E+01 0.1123660056E+02
 Pt 0.3972500079E+01 0.0000000000E+00 0.1123660056E+02
 Pt 0.3972500079E+01 0.2809000483E+01 0.1123660056E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050810E+01 0.1263333497E+02
 Pt 0.2034476341E+01 0.4209511389E+01 0.1263254851E+02
 Pt 0.5910206551E+01 0.1409050810E+01 0.1263333497E+02
 Pt 0.5910522889E+01 0.4209511389E+01 0.1263254851E+02
 Pt -0.7323442580E-01 0.1820751817E-01 0.1396481383E+02
 Pt -0.4226472957E-01 0.2820060367E+01 0.1396117218E+02
 Pt 0.3979727472E+01 0.2474855029E-01 0.1418177382E+02
 Pt 0.3953002552E+01 0.2831507037E+01 0.1435171024E+02
 Pt 0.1937929081E+01 0.1397141831E+01 0.1539961883E+02
 Pt 0.1927619953E+01 0.4276476763E+01 0.1538883076E+02
 Pt 0.5959145147E+01 0.1404892084E+01 0.1562699779E+02
 Pt 0.5981605381E+01 0.4298006542E+01 0.1557470957E+02
 Pt 0.4276874692E-01 0.3773590194E-01 0.1672152226E+02
 Pt 0.7860447763E-01 0.2839010181E+01 0.1671469210E+02
 C 0.4777718985E+01 0.2876512165E+01 0.1624090666E+02
 C 0.4106223142E+01 0.2952580490E+01 0.1754214009E+02
 H 0.4789161302E+01 0.3385072991E+01 0.1827593190E+02
 H 0.3221204714E+01 0.3602067729E+01 0.1747399996E+02
 H 0.3776171148E+01 0.1972069034E+01 0.1788912344E+02

geometry 5:

TOTAL ENERGY IS -16245.9132759 eV (-597.0242 hartree)

Pt 0.1986249809E+01 0.1404500242E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.1986249809E+01 0.4213500225E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.5958751549E+01 0.1404500242E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.5958751549E+01 0.4213500225E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660056E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000483E+01 0.1123660056E+02
 Pt 0.3972500079E+01 0.0000000000E+00 0.1123660056E+02
 Pt 0.3972500079E+01 0.2809000483E+01 0.1123660056E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050810E+01 0.1263333497E+02
 Pt 0.2034476341E+01 0.4209511389E+01 0.1263254851E+02
 Pt 0.5910206551E+01 0.1409050810E+01 0.1263333497E+02
 Pt 0.5910522889E+01 0.4209511389E+01 0.1263254851E+02
 Pt 0.5354215668E-02 0.3628389724E-01 0.1396280263E+02
 Pt 0.1911347498E-02 0.2768900903E+01 0.1396365731E+02
 Pt 0.3995691959E+01 -0.3841645972E-01 0.1410529531E+02
 Pt 0.4001942369E+01 0.2817975794E+01 0.1411128305E+02
 Pt 0.2335526869E+01 0.1370489068E+01 0.1575678452E+02

Pt 0.2022286427E+01 0.4192421935E+01 0.1542562970E+02
 Pt 0.5710818152E+01 0.1373622798E+01 0.1571975866E+02
 Pt 0.5999369403E+01 0.4202645044E+01 0.1542345603E+02
 Pt 0.4931405074E-01 0.2243793156E-01 0.1658881093E+02
 Pt 0.4483511471E-01 0.2746554524E+01 0.1658960877E+02
 C 0.4030711839E+01 0.1450341099E+01 0.1667154382E+02
 C 0.4037563468E+01 0.1587939786E+01 0.1812486777E+02
 H 0.4921589040E+01 0.2132598273E+01 0.1846066504E+02
 H 0.3122642500E+01 0.2061087228E+01 0.1848619709E+02
 H 0.4096396269E+01 0.5732825900E+00 0.1853785826E+02

geometry 6:

TOTAL ENERGY IS -16245.4725464 eV (-597.0080 hartree)

Pt 0.1986249809E+01 0.1404500242E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.1986249809E+01 0.4213500225E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.5958751549E+01 0.1404500242E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.5958751549E+01 0.4213500225E+01 0.9832001612E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660056E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000483E+01 0.1123660056E+02
 Pt 0.3972500079E+01 0.0000000000E+00 0.1123660056E+02
 Pt 0.3972500079E+01 0.2809000483E+01 0.1123660056E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050810E+01 0.1263333497E+02
 Pt 0.2034476341E+01 0.4209511389E+01 0.1263254851E+02
 Pt 0.5910206551E+01 0.1409050810E+01 0.1263333497E+02
 Pt 0.5910522889E+01 0.4209511389E+01 0.1263254851E+02
 Pt -0.7308890854E-02 -0.9565875190E-02 0.1394587695E+02
 Pt -0.6676765022E-02 0.2780922132E+01 0.1395320660E+02
 Pt 0.3966246519E+01 -0.5309929484E-01 0.1430670876E+02
 Pt 0.3961836767E+01 0.2799373349E+01 0.1430867390E+02
 Pt 0.1921654204E+01 0.1347797818E+01 0.1548895671E+02
 Pt 0.1901340677E+01 0.4175270720E+01 0.1543911413E+02
 Pt 0.6001576916E+01 0.1351531250E+01 0.1548878478E+02
 Pt 0.6027822564E+01 0.4175294005E+01 0.1543592514E+02
 Pt -0.1010308612E-01 -0.5693696410E-01 0.1673481515E+02
 Pt -0.9659252433E-02 0.2775597085E+01 0.1673140991E+02
 C 0.3962994226E+01 0.1446406112E+01 0.1589409328E+02
 C 0.3952289968E+01 0.1577790418E+01 0.1739066998E+02
 H 0.4838459015E+01 0.2110208285E+01 0.1774934532E+02
 H 0.3065768757E+01 0.2120730613E+01 0.1773242126E+02
 H 0.3941003812E+01 0.5823558300E+00 0.1784127983E+02

5. Species: Vinyl (HC-CH₂) adsorbed on Pt110. The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1:

TOTAL ENERGY IS -16246.5655381 eV (-597.0481 hartree)

Pt 0.1986250072E+01 0.1404500118E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.1986250072E+01 0.4213500337E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.5958750191E+01 0.1404500118E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.5958750191E+01 0.4213500337E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660029E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000219E+01 0.1123660029E+02
 Pt 0.3972500119E+01 0.0000000000E+00 0.1123660029E+02
 Pt 0.3972500119E+01 0.2809000219E+01 0.1123660029E+02

Pt 0.2034794022E+01 0.1409050698E+01 0.1263333429E+02
 Pt 0.2034476222E+01 0.4209511557E+01 0.1263254773E+02
 Pt 0.5910206241E+01 0.1409050698E+01 0.1263333429E+02
 Pt 0.5910524041E+01 0.4209511557E+01 0.1263254773E+02
 Pt 0.4538032563E-02 0.2055224721E-01 0.1398993668E+02
 Pt 0.3025861926E-02 0.2844880951E+01 0.1400741737E+02
 Pt 0.3979469167E+01 0.3514367770E-01 0.1418255164E+02
 Pt 0.3987069260E+01 0.2841794750E+01 0.1422230478E+02
 Pt 0.1990381684E+01 0.1449363444E+01 0.1538588382E+02
 Pt 0.1988507448E+01 0.4277939354E+01 0.1540658742E+02
 Pt 0.5968790135E+01 0.1442486846E+01 0.1541488296E+02
 Pt 0.5980427930E+01 0.4275643868E+01 0.1543055826E+02
 Pt 0.3025804695E-01 0.8624753194E-01 0.1678089929E+02
 Pt 0.8852566556E-02 0.2905687015E+01 0.1676358632E+02
 C -0.1095045128E+00 0.1399071007E+01 0.1829423941E+02
 C 0.8643463956E+00 0.2324624769E+01 0.1867910747E+02
 H -0.1065041370E+01 0.1368105124E+01 0.1881523563E+02
 H 0.6595833055E+00 0.3006023659E+01 0.1950116673E+02
 H 0.1916622363E+01 0.2171142978E+01 0.1846540092E+02

geometry 2:

TOTAL ENERGY IS -16246.3878100 eV (-597.0416 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.1780487156E-01 -0.4277345638E-02 0.1397412947E+02
 Pt 0.1787765450E-01 0.2798824871E+01 0.1398019795E+02
 Pt 0.3979327739E+01 -0.1460308585E-01 0.1419649131E+02
 Pt 0.3976831894E+01 0.2799350523E+01 0.1420030396E+02
 Pt 0.2092389700E+01 0.1381673541E+01 0.1552881872E+02
 Pt 0.1972492933E+01 0.4192226672E+01 0.1541677445E+02
 Pt 0.5974558362E+01 0.1390374831E+01 0.1541907356E+02
 Pt 0.6013138357E+01 0.4198813460E+01 0.1542876679E+02
 Pt 0.1260026079E-01 -0.8470487896E-02 0.1676758342E+02
 Pt 0.2387239836E-01 0.2766730432E+01 0.1678095174E+02
 C 0.9810783319E+00 0.1370503708E+01 0.1795052647E+02
 C 0.2393843862E+01 0.1357878521E+01 0.1760057807E+02
 H 0.6422111325E+00 0.1342566101E+01 0.1899229707E+02
 H 0.2972354528E+01 0.2241918966E+01 0.1787394597E+02
 H 0.2931994119E+01 0.4398030806E+00 0.1785023786E+02

geometry 3:

TOTAL ENERGY IS -16246.3392331 eV (-597.0398 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01

Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.2421273559E-01 0.9995234060E-03 0.1396139899E+02
 Pt 0.2821312097E-01 0.2798047774E+01 0.1396131751E+02
 Pt 0.3989198406E+01 0.2349926391E-01 0.1420999714E+02
 Pt 0.3993840474E+01 0.2814590700E+01 0.1420491885E+02
 Pt 0.2089595644E+01 0.1421177281E+01 0.1557300493E+02
 Pt 0.2020880734E+01 0.4247343667E+01 0.1539070213E+02
 Pt 0.6004685548E+01 0.1401785388E+01 0.1543191925E+02
 Pt 0.6026492669E+01 0.4202556902E+01 0.1542671898E+02
 Pt 0.3313270240E-01 -0.4277848075E-01 0.1674394993E+02
 Pt 0.9064134359E-01 0.2817523865E+01 0.1673472313E+02
 C 0.1702376899E+01 0.1847009834E+01 0.1756832427E+02
 C 0.1293684402E+01 0.6439711404E+00 0.1826585895E+02
 H 0.2485345060E+01 0.2506111472E+01 0.1795000243E+02
 H 0.2098965569E+01 -0.6885099737E-01 0.1845732903E+02
 H 0.6724543116E+00 0.7900391961E+00 0.1915439602E+02

geometry 4:

TOTAL ENERGY IS -16246.2605624 eV (-597.0369 hartree)
 Pt 0.1986250072E+01 0.1404500118E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.1986250072E+01 0.4213500337E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.5958750191E+01 0.1404500118E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.5958750191E+01 0.4213500337E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660029E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000219E+01 0.1123660029E+02
 Pt 0.3972500119E+01 0.0000000000E+00 0.1123660029E+02
 Pt 0.3972500119E+01 0.2809000219E+01 0.1123660029E+02
 Pt 0.2034794022E+01 0.1409050698E+01 0.1263333429E+02
 Pt 0.2034476222E+01 0.4209511557E+01 0.1263254773E+02
 Pt 0.5910206241E+01 0.1409050698E+01 0.1263333429E+02
 Pt 0.5910524041E+01 0.4209511557E+01 0.1263254773E+02
 Pt 0.5174899996E-01 -0.1099146891E-01 0.1395429352E+02
 Pt 0.2376940822E-01 0.2796043403E+01 0.1395513837E+02
 Pt 0.3971887030E+01 0.2113468711E-02 0.1419018964E+02
 Pt 0.3990609435E+01 0.2801667023E+01 0.1417940129E+02
 Pt 0.2096200716E+01 0.1384542778E+01 0.1559703667E+02
 Pt 0.2104922570E+01 0.4235829288E+01 0.1555315369E+02
 Pt 0.5958227195E+01 0.1384754351E+01 0.1543643981E+02
 Pt 0.5967347303E+01 0.4170460781E+01 0.1542715474E+02
 Pt -0.4463888064E-01 -0.5247464119E-01 0.1661635045E+02
 Pt 0.5881708372E-01 0.2770001656E+01 0.1668573959E+02
 C 0.1954901340E+01 0.2325562345E+01 0.1741460401E+02
 C 0.2754950610E+01 0.3534295442E+01 0.1740620060E+02
 H 0.1956836073E+01 0.1660829438E+01 0.1828163192E+02
 H 0.2511432830E+01 0.4249692139E+01 0.1819522968E+02
 H 0.3838302502E+01 0.3395229691E+01 0.1733128448E+02

geometry 5:

TOTAL ENERGY IS -16246.2464945 eV (-597.0364 hartree)

Pt 0.1986250072E+01 0.1404500118E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.1986250072E+01 0.4213500337E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.5958750191E+01 0.1404500118E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.5958750191E+01 0.4213500337E+01 0.9832000649E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660029E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000219E+01 0.1123660029E+02
 Pt 0.3972500119E+01 0.0000000000E+00 0.1123660029E+02
 Pt 0.3972500119E+01 0.2809000219E+01 0.1123660029E+02
 Pt 0.2034794022E+01 0.1409050698E+01 0.1263333429E+02
 Pt 0.2034476222E+01 0.4209511557E+01 0.1263254773E+02
 Pt 0.5910206241E+01 0.1409050698E+01 0.1263333429E+02
 Pt 0.5910524041E+01 0.4209511557E+01 0.1263254773E+02
 Pt 0.6300233305E-01 -0.6803699781E-02 0.1394246959E+02
 Pt 0.3309821616E-01 0.2798732850E+01 0.1394005192E+02
 Pt 0.4002608321E+01 0.8917735147E-02 0.1417796587E+02
 Pt 0.4016351600E+01 0.2805663781E+01 0.1416253226E+02
 Pt 0.2133530372E+01 0.1381171625E+01 0.1557980871E+02
 Pt 0.2146121250E+01 0.4238967763E+01 0.1553103393E+02
 Pt 0.5982223833E+01 0.1403129953E+01 0.1544222871E+02
 Pt 0.5996767610E+01 0.4180146301E+01 0.1542769901E+02
 Pt -0.4418316987E-02 -0.3088402625E-01 0.1661134580E+02
 Pt 0.1173693392E+00 0.2790868698E+01 0.1667449014E+02
 C 0.2020014066E+01 0.2339628473E+01 0.1738954270E+02
 C 0.2862078739E+01 0.3517775017E+01 0.1735618568E+02
 H 0.1992691136E+01 0.1699584669E+01 0.1827281359E+02
 H 0.2677428350E+01 0.4258137718E+01 0.1813653182E+02
 H 0.3934904844E+01 0.3335158509E+01 0.1723215886E+02

geometry 6:

TOTAL ENERGY IS -16246.2405929 eV (-597.0362 hartree)

Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5151704877E-01 -0.3634344249E-03 0.1395360476E+02
 Pt 0.2295961758E-01 0.2809388032E+01 0.1395039166E+02
 Pt 0.3935213961E+01 -0.2368961234E-01 0.1420240840E+02
 Pt 0.3959748502E+01 0.2789773835E+01 0.1419270036E+02
 Pt 0.2077281511E+01 0.1353328180E+01 0.1559517623E+02
 Pt 0.2073939102E+01 0.4193670414E+01 0.1563308282E+02
 Pt 0.5932149828E+01 0.1406780336E+01 0.1541931607E+02
 Pt 0.5917939207E+01 0.4200882120E+01 0.1542516161E+02
 Pt -0.8238605128E-01 0.1104668485E-01 0.1661738093E+02
 Pt -0.1163015406E-01 0.2816863993E+01 0.1667871999E+02
 C 0.1850988645E+01 0.3269206871E+01 0.1745654742E+02
 C 0.2614420811E+01 0.2035158544E+01 0.1749759377E+02
 H 0.1822859424E+01 0.3942722061E+01 0.1831642097E+02
 H 0.3701992181E+01 0.2143894788E+01 0.1750155223E+02

H 0.2286825445E+01 0.1336177335E+01 0.1827098845E+02

geometry 7:

TOTAL ENERGY IS -16246.0864386 eV (-597.0305 hartree)

Pt 0.1986250230E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250230E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.1404500320E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750636E+01 0.4213500921E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500405E+01 0.2809000601E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794180E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476380E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206686E+01 0.1409050900E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524486E+01 0.4209512141E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.1028523123E-01 0.5260378800E-01 0.1395844146E+02
 Pt -0.1425516518E-01 0.2783148011E+01 0.1396781765E+02
 Pt 0.3984180207E+01 0.2231731756E-01 0.1415122691E+02
 Pt 0.3979642197E+01 0.2850637521E+01 0.1413448038E+02
 Pt 0.2265255249E+01 0.1447517482E+01 0.1573025481E+02
 Pt 0.2025754613E+01 0.4255594156E+01 0.1541953105E+02
 Pt 0.5748951244E+01 0.1436224757E+01 0.1576063689E+02
 Pt 0.5983768546E+01 0.4240090650E+01 0.1540852104E+02
 Pt 0.4976135933E-01 0.7356683562E-01 0.1660922905E+02
 Pt 0.4768146413E-01 0.2831508381E+01 0.1661141144E+02
 C 0.4676329044E+01 0.8574101940E+00 0.1755113613E+02
 C 0.3822468922E+01 0.1769330951E+01 0.1692065568E+02
 H 0.5234295724E+01 0.1198430629E+01 0.1842246276E+02
 H 0.4482809018E+01 -0.2038928442E+00 0.1752221480E+02
 H 0.3849306460E+01 0.2799329777E+01 0.1726825274E+02

geometry 8:

TOTAL ENERGY IS -16245.9902495 eV (-597.0270 hartree)

Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt -0.5499118659E-01 -0.3070077708E-01 0.1397634185E+02
 Pt -0.7414247975E-02 0.2819131237E+01 0.1395202604E+02
 Pt 0.3944509695E+01 -0.5360757468E-02 0.1415029542E+02
 Pt 0.3961395755E+01 0.2772781400E+01 0.1407930019E+02
 Pt 0.1962942684E+01 0.1320526937E+01 0.1542715329E+02
 Pt 0.2333830318E+01 0.4071455324E+01 0.1581142220E+02
 Pt 0.5717056694E+01 0.1474213360E+01 0.1572785919E+02
 Pt 0.5684305940E+01 0.4241031043E+01 0.1569581026E+02
 Pt -0.2974762183E-01 -0.5843241493E-01 0.1659103907E+02
 Pt -0.9906306345E-03 0.2821455888E+01 0.1656432147E+02

C 0.4076054894E+01 0.3665574237E+01 0.1687800666E+02
 C 0.4444237254E+01 0.2281214171E+01 0.1721802338E+02
 H 0.4044882092E+01 0.4370035323E+01 0.1771418212E+02
 H 0.4990857760E+01 0.2215340805E+01 0.1816172384E+02
 H 0.3610931930E+01 0.1560201326E+01 0.1719533976E+02

geometry 9:

TOTAL ENERGY IS -16245.8645849 eV (-597.0224 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.1714912151E-01 0.5240603151E-01 0.1398483736E+02
 Pt 0.1214884180E-01 0.2840516912E+01 0.1396855346E+02
 Pt 0.3998346465E+01 0.7508175176E-01 0.1421400881E+02
 Pt 0.3997456049E+01 0.2891910087E+01 0.1421439876E+02
 Pt 0.2068415042E+01 0.1498411139E+01 0.1554301375E+02
 Pt 0.1974819526E+01 0.4274049131E+01 0.1537805827E+02
 Pt 0.5957674506E+01 0.1511693419E+01 0.1544350601E+02
 Pt 0.6007410269E+01 0.4364724849E+01 0.1546233597E+02
 Pt -0.1175861343E-02 0.1080946104E+00 0.1683678594E+02
 Pt -0.9024381285E-01 0.2975027665E+01 0.1671653208E+02
 C 0.1955164239E+01 0.8354086316E+00 0.1743594168E+02
 C 0.1019119047E+01 0.1334833023E+01 0.1834119048E+02
 H 0.2691638986E+01 0.9516706084E-01 0.1773459652E+02
 H 0.8937489064E+00 0.9102294881E+00 0.1933657352E+02
 H 0.7721835798E+00 0.2435268231E+01 0.1839411392E+02

geometry 10:

TOTAL ENERGY IS -16245.7902450 eV (-597.0196 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.2840617329E-02 -0.2036694188E-01 0.1399081602E+02
 Pt 0.1218121376E-02 0.2793079093E+01 0.1396458568E+02
 Pt 0.3975271839E+01 -0.4700930325E-01 0.1422640395E+02
 Pt 0.3970789513E+01 0.2763746575E+01 0.1423169960E+02
 Pt 0.1991495208E+01 0.1349997927E+01 0.1543894726E+02
 Pt 0.1988871325E+01 0.4161924285E+01 0.1544631489E+02

Pt 0.5963446802E+01 0.1345469388E+01 0.1545319314E+02
Pt 0.5966265637E+01 0.4162153555E+01 0.1545454794E+02
Pt 0.2430712998E-01 -0.5601918809E-01 0.1673809623E+02
Pt 0.3244637425E-02 0.2745234146E+01 0.1668342880E+02
C 0.2247983459E+00 0.2757234126E+00 0.1867794726E+02
C 0.1262187307E+01 0.8327630011E+00 0.1928549563E+02
H -0.6580235740E+00 -0.4916616695E-01 0.1922638185E+02
H 0.1248720121E+01 0.9656824725E+00 0.2036501036E+02
H 0.2155709461E+01 0.1148607359E+01 0.1876414241E+02

geometry 11:

TOTAL ENERGY IS -16245.7817139 eV (-597.0193 hartree)
Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
Pt 0.1182818503E-01 0.9392235230E-01 0.1397660951E+02
Pt -0.6930086712E-02 0.2853694982E+01 0.1395901643E+02
Pt 0.3971439850E+01 0.5860958047E-01 0.1413957139E+02
Pt 0.3966554930E+01 0.2874166217E+01 0.1439709403E+02
Pt 0.1987635054E+01 0.1468632900E+01 0.1560415013E+02
Pt 0.1911448458E+01 0.4369772031E+01 0.1540108719E+02
Pt 0.5961549783E+01 0.1450564015E+01 0.1552262490E+02
Pt 0.6009094071E+01 0.4335089156E+01 0.1540090290E+02
Pt -0.3285522394E-02 0.9059683856E-01 0.1673880633E+02
Pt -0.2094279050E-01 0.2935406296E+01 0.1668778381E+02
C 0.3575335209E+01 0.2344172745E+01 0.1646437926E+02
C 0.4613634615E+01 0.1564505242E+01 0.1709827963E+02
H 0.3374928490E+01 0.3297472594E+01 0.1696915004E+02
H 0.5091051280E+01 0.2064730868E+01 0.1793973560E+02
H 0.4357549776E+01 0.5323819995E+00 0.1732565154E+02

geometry 12:

TOTAL ENERGY IS -16245.7625883 eV (-597.0186 hartree)
Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
Pt 0.4062950632E-01 0.1208522137E-01 0.1395552656E+02
Pt 0.2117619652E-01 0.2815050043E+01 0.1393078291E+02

Pt 0.3944947390E+01 -0.2260685532E-03 0.1416684183E+02
 Pt 0.3963185106E+01 0.2821337231E+01 0.1407518701E+02
 Pt 0.2066521537E+01 0.1331107276E+01 0.1556389115E+02
 Pt 0.2320248524E+01 0.4050866004E+01 0.1583597726E+02
 Pt 0.5743216243E+01 0.1489603627E+01 0.1560997022E+02
 Pt 0.5904921481E+01 0.4263292704E+01 0.1540418083E+02
 Pt -0.1126635758E-01 -0.2455961502E-01 0.1656688820E+02
 Pt -0.3677045538E-01 0.2828256831E+01 0.1654552194E+02
 C 0.3082416714E+01 0.2405145645E+01 0.1694363496E+02
 C 0.4466161725E+01 0.1974441949E+01 0.1719369353E+02
 H 0.2535370365E+01 0.2499346837E+01 0.1789035902E+02
 H 0.5012013508E+01 0.2695256358E+01 0.1781057603E+02
 H 0.4422229788E+01 0.1016363579E+01 0.1772430527E+02

geometry 13:

TOTAL ENERGY IS -16245.7014654 eV (-597.0164 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.1227907922E-01 -0.4861698889E-02 0.1394553002E+02
 Pt -0.2991315297E-02 0.2783840597E+01 0.1397985048E+02
 Pt 0.4009180074E+01 -0.3570336283E-01 0.1417351305E+02
 Pt 0.4024811404E+01 0.2780940627E+01 0.1418426667E+02
 Pt 0.2123353642E+01 0.1340185014E+01 0.1551745870E+02
 Pt 0.1989235191E+01 0.4186323541E+01 0.1534504514E+02
 Pt 0.5968379886E+01 0.1347730247E+01 0.1546622642E+02
 Pt 0.5969742239E+01 0.4119175339E+01 0.1547763257E+02
 Pt -0.6002221123E-01 -0.1184895965E+00 0.1664509889E+02
 Pt 0.6022213989E-01 0.2724650041E+01 0.1677373459E+02
 C 0.1904945789E+01 0.2356471094E+01 0.1749306703E+02
 C 0.2492157852E+01 0.1103751855E+01 0.1766902409E+02
 H 0.2537365391E+01 0.3221464332E+01 0.1769836704E+02
 H 0.3553324847E+01 0.1037824433E+01 0.1789398039E+02
 H 0.1897412006E+01 0.2457132101E+00 0.1798926498E+02

geometry 14:

TOTAL ENERGY IS -16245.6891967 eV (-597.0159 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02

Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.7576748199E-01 -0.4435254683E-02 0.1398340246E+02
 Pt 0.3720119234E-01 0.2810786527E+01 0.1395971398E+02
 Pt 0.3978571455E+01 0.4498800384E-01 0.1413550432E+02
 Pt 0.3983309670E+01 0.2852517936E+01 0.1432247994E+02
 Pt 0.2014027407E+01 0.1368677801E+01 0.1557542110E+02
 Pt 0.2014946949E+01 0.4269640893E+01 0.1557240652E+02
 Pt 0.6013235468E+01 0.1392372610E+01 0.1539829247E+02
 Pt 0.6014736597E+01 0.4269485729E+01 0.1541463313E+02
 Pt -0.2412345781E-01 0.1157421663E-01 0.1671552772E+02
 Pt -0.3508033550E-01 0.2821185741E+01 0.1667678488E+02
 C 0.3591069600E+01 0.3311703020E+01 0.1636281433E+02
 C 0.3277352584E+01 0.2081926205E+01 0.1705887110E+02
 H 0.4329909573E+01 0.4021366599E+01 0.1680101069E+02
 H 0.4118683549E+01 0.1388314708E+01 0.1717561031E+02
 H 0.2749060347E+01 0.2224848620E+01 0.1800450080E+02

geometry 15:

TOTAL ENERGY IS -16244.9331787 eV (-596.9881 hartree)
 Pt 0.1986250024E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.1986250024E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.1404500039E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.5958750064E+01 0.4213500112E+01 0.9832000216E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.0000000000E+00 0.1123659978E+02
 Pt 0.3972500040E+01 0.2809000073E+01 0.1123659978E+02
 Pt 0.2034793974E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.2034476174E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.5910206114E+01 0.1409050619E+01 0.1263333372E+02
 Pt 0.5910523914E+01 0.4209511332E+01 0.1263254716E+02
 Pt 0.6383774598E-01 0.4277887003E-01 0.1397588108E+02
 Pt 0.2537783612E-01 0.2848556405E+01 0.1394258074E+02
 Pt 0.3896690872E+01 0.6992401839E-01 0.1417322687E+02
 Pt 0.3927544240E+01 0.2879748934E+01 0.1446674907E+02
 Pt 0.1881755126E+01 0.1471479400E+01 0.1561323536E+02
 Pt 0.1879136234E+01 0.4316475541E+01 0.1560332246E+02
 Pt 0.5980596021E+01 0.1423230575E+01 0.1535494036E+02
 Pt 0.5980230167E+01 0.4360974307E+01 0.1535629382E+02
 Pt -0.1234363881E+00 0.9182838736E-01 0.1677590560E+02
 Pt -0.1940752949E+00 0.2900000292E+01 0.1671285660E+02
 C 0.2634322671E+01 0.2902939527E+01 0.1687973958E+02
 C 0.4040258257E+01 0.2912886282E+01 0.1663783883E+02
 H 0.2264169105E+01 0.2914171531E+01 0.1790720555E+02
 H 0.4567432101E+01 0.3828014457E+01 0.1698204714E+02
 H 0.4599205978E+01 0.2030489641E+01 0.1700772994E+02

6. Species: Ethyne (HC-CH) adsorbed on Pt110. The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1:

TOTAL ENERGY IS -16230.0989387 eV (-596.4430 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01

Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.1701141468E-01 -0.6101501379E-02 0.1396919251E+02
 Pt 0.3037855481E-01 0.2788364166E+01 0.1399404859E+02
 Pt 0.3985171833E+01 -0.8368599911E-02 0.1421102389E+02
 Pt 0.3981532075E+01 0.2805276591E+01 0.1421447232E+02
 Pt 0.2077894605E+01 0.1411347012E+01 0.1556449182E+02
 Pt 0.1980396964E+01 0.4236971777E+01 0.1540795587E+02
 Pt 0.5980722599E+01 0.1388122584E+01 0.1541113113E+02
 Pt 0.6028722890E+01 0.4175888267E+01 0.1544011276E+02
 Pt -0.2874878463E-01 -0.2580225321E-01 0.1678018727E+02
 Pt 0.2761444026E-03 0.2849099804E+01 0.1684126033E+02
 C 0.7924416743E+00 0.1234802494E+01 0.1810235402E+02
 C 0.1846284958E+01 0.1894597481E+01 0.1752832723E+02
 H 0.5537036753E+00 0.1174531944E+01 0.1916212404E+02
 H 0.2650070500E+01 0.2421575861E+01 0.1803543961E+02

geometry 2:

TOTAL ENERGY IS -16229.8207139 eV (-596.4328 hartree)
 Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.2158791821E-01 0.7504429258E-02 0.1395172645E+02
 Pt -0.8397275559E-02 0.2817248760E+01 0.1397773315E+02
 Pt 0.3935404626E+01 0.1379902561E-01 0.1417512699E+02
 Pt 0.3951785809E+01 0.2822122683E+01 0.1418452052E+02
 Pt 0.2004666897E+01 0.1416721963E+01 0.1551620381E+02
 Pt 0.2006377202E+01 0.4241006330E+01 0.1552146308E+02
 Pt 0.5904504438E+01 0.1434577678E+01 0.1543743351E+02
 Pt 0.5900159620E+01 0.4212950309E+01 0.1544104793E+02
 Pt -0.1426265422E+00 0.1076895325E-01 0.1664245719E+02
 Pt -0.1018598384E+00 0.2820538115E+01 0.1678207590E+02
 C 0.1881764966E+01 0.2142578793E+01 0.1739713965E+02
 C 0.1870814608E+01 0.3515486692E+01 0.1740284023E+02
 H 0.2075779420E+01 0.1516579825E+01 0.1826198786E+02
 H 0.2049954215E+01 0.4144840031E+01 0.1826970136E+02

geometry 3:

TOTAL ENERGY IS -16229.8119701 eV (-596.4325 hartree)
Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
Pt -0.2519857440E-02 0.2533838942E-01 0.1399431104E+02
Pt -0.2494248860E-02 0.2841748709E+01 0.1399480087E+02
Pt 0.3989552719E+01 0.4866840280E-01 0.1423677917E+02
Pt 0.3987661544E+01 0.2866237684E+01 0.1424220175E+02
Pt 0.1980096119E+01 0.1466824606E+01 0.1540382576E+02
Pt 0.1975245420E+01 0.4279593338E+01 0.1542740366E+02
Pt 0.5988687180E+01 0.1468066049E+01 0.1544057720E+02
Pt 0.6006842525E+01 0.4279870427E+01 0.1546461004E+02
Pt 0.4035401091E-01 0.8705127806E-01 0.1680005395E+02
Pt 0.3843371615E-01 0.2881116856E+01 0.1679113353E+02
C 0.3567201979E+00 0.8368629382E+00 0.1861277127E+02
C 0.3437020110E+00 0.2160012628E+01 0.1861205319E+02
H 0.5403460825E+00 0.1620820821E+00 0.1944463127E+02
H 0.5036204910E+00 0.2847216047E+01 0.1943830584E+02

geometry 4:

TOTAL ENERGY IS -16229.6153418 eV (-596.4252 hartree)
Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
Pt -0.5324034077E-02 0.1516480448E-02 0.1398774118E+02
Pt 0.3414501232E-04 0.2810337272E+01 0.1394277222E+02
Pt 0.3985864145E+01 0.1629613360E-02 0.1417332830E+02
Pt 0.3983255203E+01 0.2810698767E+01 0.1402011194E+02
Pt 0.2192860670E+01 0.1431468572E+01 0.1563397414E+02
Pt 0.2196573982E+01 0.4189807174E+01 0.1564269930E+02
Pt 0.5787792166E+01 0.1429967819E+01 0.1562654866E+02
Pt 0.5783581054E+01 0.4190332267E+01 0.1563345749E+02
Pt 0.2098053427E-01 0.2059191846E-02 0.1658728480E+02
Pt 0.1835374505E-01 0.2812755932E+01 0.1655546865E+02
C 0.3270942458E+01 0.2803614010E+01 0.1678531827E+02
C 0.4711871299E+01 0.2804005440E+01 0.1677996908E+02
H 0.2844132329E+01 0.2799432747E+01 0.1779188186E+02
H 0.5145405521E+01 0.2800609235E+01 0.1778374808E+02

geometry 5:

TOTAL ENERGY IS -16229.5808716 eV (-596.4240 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.6293254056E-01 0.1301746087E-01 0.1397041469E+02
 Pt 0.1205367823E-01 0.2818385661E+01 0.1397060148E+02
 Pt 0.3941015661E+01 0.2059249559E-01 0.1417957416E+02
 Pt 0.3974609452E+01 0.2830079153E+01 0.1414255653E+02
 Pt 0.2031976581E+01 0.1441497675E+01 0.1555669284E+02
 Pt 0.2021865547E+01 0.4238338915E+01 0.1553756584E+02
 Pt 0.5930156735E+01 0.1432519722E+01 0.1541449820E+02
 Pt 0.5932754927E+01 0.4242211055E+01 0.1541318709E+02
 Pt -0.9122335124E-01 0.3946319772E-01 0.1666601427E+02
 Pt -0.1531364966E+00 0.2844808292E+01 0.1678620406E+02
 C 0.1499558861E+01 0.2822396573E+01 0.1782773241E+02
 C 0.2590801919E+01 0.2870210095E+01 0.1700994334E+02
 H 0.1509773582E+01 0.2779176337E+01 0.1891710228E+02
 H 0.3631482452E+01 0.2878484569E+01 0.1732310298E+02

geometry 6:

TOTAL ENERGY IS -16229.4754440 eV (-596.4201 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt -0.6105183956E-02 -0.9768280805E-02 0.1394634882E+02
 Pt -0.5564084528E-02 0.2753651729E+01 0.1395980954E+02
 Pt 0.3969220846E+01 -0.6381914779E-01 0.1412845860E+02
 Pt 0.3968071378E+01 0.2745602216E+01 0.1414889714E+02
 Pt 0.2135494945E+01 0.1318078134E+01 0.1560766596E+02
 Pt 0.2020000301E+01 0.4126580363E+01 0.1543692696E+02
 Pt 0.5796556087E+01 0.1320029254E+01 0.1560342817E+02
 Pt 0.5908339720E+01 0.4129590021E+01 0.1543471918E+02
 Pt -0.9843944284E-02 -0.9341598935E-01 0.1658084378E+02
 Pt -0.1404578751E-01 0.2722863058E+01 0.1659659134E+02
 C 0.3309670727E+01 0.1086722307E+01 0.1720956884E+02
 C 0.4626921374E+01 0.1088362853E+01 0.1720767349E+02

H 0.2742258031E+01 0.9430093541E+00 0.1812599624E+02
 H 0.5197776605E+01 0.9459565283E+00 0.1812315778E+02

geometry 7:

TOTAL ENERGY IS -16229.4036956 eV (-596.4175 hartree)
 Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.6352960982E-01 -0.1398917492E-01 0.1395930348E+02
 Pt 0.2472187276E-01 0.2794231485E+01 0.1395028881E+02
 Pt 0.3985105481E+01 -0.2330115538E-01 0.1416998783E+02
 Pt 0.3972889746E+01 0.2780215104E+01 0.1414922811E+02
 Pt 0.2098205705E+01 0.1370831642E+01 0.1556830038E+02
 Pt 0.2103308988E+01 0.4196541891E+01 0.1557781992E+02
 Pt 0.5935446424E+01 0.1377430060E+01 0.1542921166E+02
 Pt 0.5934314084E+01 0.4171455647E+01 0.1543043745E+02
 Pt -0.4210971564E-01 -0.3975780650E-01 0.1660239463E+02
 Pt -0.2583368676E-01 0.2770747512E+01 0.1662182351E+02
 C 0.2724415070E+01 0.2122524085E+01 0.1731686306E+02
 C 0.2721401224E+01 0.3447771891E+01 0.1733140160E+02
 H 0.3069480046E+01 0.1444832328E+01 0.1809064694E+02
 H 0.3053303638E+01 0.4100907599E+01 0.1813288461E+02

geometry 8:

TOTAL ENERGY IS -16229.3928392 eV (-596.4171 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.4845432884E-02 0.1167581640E-01 0.1400213038E+02
 Pt 0.3807492668E-02 0.2825940502E+01 0.1400360761E+02
 Pt 0.3984490448E+01 0.1472969592E-01 0.1420888265E+02
 Pt 0.3985809815E+01 0.2836700820E+01 0.1421266478E+02
 Pt 0.2009103465E+01 0.1432688997E+01 0.1541663680E+02
 Pt 0.1949803520E+01 0.4239130967E+01 0.1542992558E+02
 Pt 0.5959876816E+01 0.1430812997E+01 0.1542941042E+02
 Pt 0.6031135270E+01 0.4241264254E+01 0.1544660398E+02
 Pt 0.1602376473E-01 0.3818267741E-01 0.1686003390E+02
 Pt 0.9573557008E-02 0.2823872998E+01 0.1684677382E+02

C -0.5362742281E+00 0.1436110651E+01 0.1834948609E+02
 C 0.7887000807E+00 0.1439585367E+01 0.1826354702E+02
 H -0.1344732622E+01 0.1462588028E+01 0.1906174174E+02
 H 0.1690363225E+01 0.1471393904E+01 0.1885135129E+02

geometry 9:

TOTAL ENERGY IS -16229.3422194 eV (-596.4152 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.1328322726E+00 0.2254485973E-01 0.1401739670E+02
 Pt 0.1545941348E-01 0.2792195582E+01 0.1394360826E+02
 Pt 0.3942608259E+01 0.3567397359E-02 0.1413402720E+02
 Pt 0.3954687916E+01 0.2821202353E+01 0.1404513511E+02
 Pt 0.2123354425E+01 0.1293779748E+01 0.1573283348E+02
 Pt 0.2173051876E+01 0.4121586901E+01 0.1562197327E+02
 Pt 0.5615139502E+01 0.1486242570E+01 0.1569273533E+02
 Pt 0.5891345942E+01 0.4247769546E+01 0.1540682919E+02
 Pt -0.1094704908E+00 0.7214884997E-02 0.1661474806E+02
 Pt -0.8611858374E-01 0.2796110264E+01 0.1655513522E+02
 C 0.3976749217E+01 0.1810700213E+01 0.1682974536E+02
 C 0.3048032002E+01 0.2852307731E+01 0.1693947948E+02
 H 0.4121999530E+01 0.1199604849E+01 0.1772257085E+02
 H 0.2681842010E+01 0.3086942957E+01 0.1793791949E+02

geometry 10:

TOTAL ENERGY IS -16229.2601112 eV (-596.4122 hartree)
 Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.2271624754E-01 0.2488924971E-01 0.1397553158E+02
 Pt -0.5040258880E-02 0.2825760745E+01 0.1400460116E+02
 Pt 0.3983244486E+01 0.1472705859E-01 0.1415736801E+02
 Pt 0.3985867431E+01 0.2867705973E+01 0.1415674707E+02
 Pt 0.2101434680E+01 0.1395869621E+01 0.1543979096E+02
 Pt 0.1972773186E+01 0.4176659135E+01 0.1550393228E+02
 Pt 0.5911763566E+01 0.1536307651E+01 0.1544000878E+02
 Pt 0.5949691804E+01 0.4359996545E+01 0.1544954784E+02

Pt -0.6357025879E-01 0.2027099507E+00 0.1671625869E+02
 Pt -0.2206679524E+00 0.3079649128E+01 0.1687365657E+02
 C 0.1273917076E+01 0.1577479817E+01 0.1754074235E+02
 C 0.1867312505E+01 0.2785190235E+01 0.1717313659E+02
 H 0.1544006310E+01 0.1139119118E+01 0.1850302679E+02
 H 0.2588064872E+01 0.3256403751E+01 0.1784110947E+02

geometry 11:

TOTAL ENERGY IS -16228.9662968 eV (-596.4014 hartree)
 Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt -0.6196583563E-02 0.5796430241E-01 0.1395617063E+02
 Pt 0.1422536756E-01 0.2847211756E+01 0.1395657533E+02
 Pt 0.3987980084E+01 0.7193388616E-01 0.1437358183E+02
 Pt 0.3994020933E+01 0.2894805562E+01 0.1434908985E+02
 Pt 0.1866792894E+01 0.1469812586E+01 0.1551225850E+02
 Pt 0.1887907713E+01 0.4269366715E+01 0.1540209121E+02
 Pt 0.6112529201E+01 0.1495580855E+01 0.1552366270E+02
 Pt 0.6087378936E+01 0.4316051415E+01 0.1542293091E+02
 Pt 0.1228477341E-01 0.4061718666E-01 0.1680485695E+02
 Pt 0.3302534795E-01 0.2932653322E+01 0.1679847974E+02
 C 0.3645153365E+01 0.9024875703E+00 0.1628085039E+02
 C 0.4343666120E+01 0.2132113585E+01 0.1626823164E+02
 H 0.3677261809E+01 0.2412378272E+00 0.1714103861E+02
 H 0.4323958663E+01 0.2815751670E+01 0.1711450584E+02

geometry 12:

TOTAL ENERGY IS -16228.8975772 eV (-596.3989 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.1041734018E+00 -0.3587962329E-01 0.1400027431E+02
 Pt 0.2652836127E-01 0.2758217097E+01 0.1395442353E+02
 Pt 0.3923940098E+01 -0.1543236301E+00 0.1416079692E+02
 Pt 0.3930388541E+01 0.2635981616E+01 0.1438536187E+02
 Pt 0.1919728640E+01 0.1162419849E+01 0.1571339072E+02
 Pt 0.1918984885E+01 0.4112096018E+01 0.1557891801E+02

Pt 0.5987668618E+01 0.1185199348E+01 0.1536375428E+02
 Pt 0.5936152286E+01 0.4073933363E+01 0.1539938624E+02
 Pt -0.1564641992E+00 -0.1979694471E+00 0.1676076301E+02
 Pt -0.1497478982E+00 0.2643926341E+01 0.1668750362E+02
 C 0.2715351555E+01 0.2941117636E+01 0.1697100353E+02
 C 0.3641078053E+01 0.2127277524E+01 0.1638240087E+02
 H 0.2553698216E+01 0.3039375656E+01 0.1804052009E+02
 H 0.4378105918E+01 0.1544876754E+01 0.1694740359E+02

geometry 13:

TOTAL ENERGY IS -16228.8191137 eV (-596.3960 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.4637486256E-02 0.1397554642E-01 0.1393389645E+02
 Pt 0.5583899387E-02 0.2823732036E+01 0.1403893399E+02
 Pt 0.3990442397E+01 0.2949515671E-01 0.1417875794E+02
 Pt 0.3993097562E+01 0.2837920063E+01 0.1422989367E+02
 Pt 0.2013399588E+01 0.1436115613E+01 0.1542076766E+02
 Pt 0.2017693646E+01 0.4258941120E+01 0.1541886067E+02
 Pt 0.5968915647E+01 0.1442131835E+01 0.1544093564E+02
 Pt 0.5965219910E+01 0.4260007786E+01 0.1543928132E+02
 Pt 0.2123486365E-01 0.5515534804E-01 0.1663899965E+02
 Pt 0.3731534634E-01 0.2867726867E+01 0.1679963027E+02
 C -0.4619451419E+00 0.3010853202E+01 0.1883689451E+02
 C 0.7885434958E+00 0.3023550129E+01 0.1876436768E+02
 H -0.1403760949E+01 0.3022741381E+01 0.1934798689E+02
 H 0.1784314471E+01 0.3050324378E+01 0.1915880808E+02

7. Species: Vinylidene (C-CH₂) adsorbed on Pt110. The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1:

TOTAL ENERGY IS -16230.0717993 eV (-596.4420 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02

Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.1036705338E-01 0.3977122539E-03 0.1395909067E+02
 Pt 0.1864558353E-01 0.2797402203E+01 0.1400629520E+02
 Pt 0.3980799140E+01 -0.1591255940E-01 0.1420199556E+02
 Pt 0.3970891196E+01 0.2791818205E+01 0.1421317894E+02
 Pt 0.2076909734E+01 0.1398425317E+01 0.1555452393E+02
 Pt 0.1990378770E+01 0.4189648618E+01 0.1541675729E+02
 Pt 0.5965062690E+01 0.1405981312E+01 0.1542161973E+02
 Pt 0.5993069373E+01 0.4209218555E+01 0.1543126532E+02
 Pt -0.8225756000E-02 -0.1516437849E-01 0.1673266540E+02
 Pt -0.9373537412E-01 0.2938096752E+01 0.1687181101E+02
 C 0.1232519965E+01 0.1387600941E+01 0.1736577149E+02
 C 0.1227656403E+01 0.2194513053E+01 0.1848799273E+02
 H 0.2058282608E+01 0.2862091817E+01 0.1869405079E+02
 H 0.6403435345E+00 0.1893251896E+01 0.1935101169E+02

geometry 2:

TOTAL ENERGY IS -16229.8179686 eV (-596.4327 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.3515945792E-01 0.2490790141E-01 0.1396811713E+02
 Pt 0.5566635352E-03 0.2827009932E+01 0.1399626905E+02
 Pt 0.3940419737E+01 0.3542854110E-01 0.1417165358E+02
 Pt 0.3958867568E+01 0.2840869787E+01 0.1417747072E+02
 Pt 0.2036731760E+01 0.1450116860E+01 0.1560090730E+02
 Pt 0.2017582762E+01 0.4278454694E+01 0.1555443740E+02
 Pt 0.5900157894E+01 0.1456938409E+01 0.1544322850E+02
 Pt 0.5902132224E+01 0.4260305716E+01 0.1543007646E+02
 Pt -0.1098357195E+00 0.5610590077E-01 0.1666980450E+02
 Pt -0.2099932966E+00 0.2869475058E+01 0.1687009732E+02
 C 0.1853485907E+01 0.2886333280E+01 0.1697166299E+02
 C 0.1494379903E+01 0.2945577509E+01 0.1830893446E+02
 H 0.1561979115E+01 0.3893461738E+01 0.1883075599E+02
 H 0.1524897105E+01 0.2060143706E+01 0.1893368394E+02

geometry 3:

TOTAL ENERGY IS -16229.7965774 eV (-596.4319 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02

Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt -0.3733586018E-01 -0.3977497214E-01 0.1397338605E+02
 Pt 0.2442838210E-02 0.2781308560E+01 0.1396483810E+02
 Pt 0.3965240469E+01 -0.7196421999E-01 0.1416838708E+02
 Pt 0.3947667999E+01 0.2733001820E+01 0.1418037280E+02
 Pt 0.1954536000E+01 0.1250446601E+01 0.1540017149E+02
 Pt 0.2109990419E+01 0.4088070350E+01 0.1566133036E+02
 Pt 0.5796129032E+01 0.1332332149E+01 0.1575891740E+02
 Pt 0.5966939560E+01 0.4206062251E+01 0.1551447745E+02
 Pt 0.1193061934E-01 -0.8353679233E-01 0.1667026656E+02
 Pt 0.2819662474E-01 0.2696962081E+01 0.1665191212E+02
 C 0.4607368470E+01 0.2917460962E+01 0.1613681134E+02
 C 0.3550709663E+01 0.3311421122E+01 0.1703621679E+02
 H 0.3075589186E+01 0.2493921100E+01 0.1758074659E+02
 H 0.3801707504E+01 0.4144146983E+01 0.1769900426E+02

geometry 4:

TOTAL ENERGY IS -16229.7125690 eV (-596.4288 hartree)
 Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.4318603169E-01 -0.2557692606E-01 0.1395536365E+02
 Pt 0.2888871762E-02 0.2789939767E+01 0.1395879338E+02
 Pt 0.3977686838E+01 -0.2521548323E-01 0.1414857100E+02
 Pt 0.3990328166E+01 0.2774990407E+01 0.1414834315E+02
 Pt 0.2042364171E+01 0.1344768265E+01 0.1549916671E+02
 Pt 0.2101369528E+01 0.4230139123E+01 0.1553119122E+02
 Pt 0.5922274958E+01 0.1350591359E+01 0.1543625968E+02
 Pt 0.5933155024E+01 0.4160598079E+01 0.1543697809E+02
 Pt -0.7696224489E-01 -0.5865107658E-01 0.1663773475E+02
 Pt -0.7523601495E-01 0.2756488846E+01 0.1672622440E+02
 C 0.1885435643E+01 0.2677767926E+01 0.1696153846E+02
 C 0.2881309414E+01 0.3494203086E+01 0.1747583722E+02
 H 0.2665476094E+01 0.4196852970E+01 0.1827239069E+02
 H 0.3922557442E+01 0.3199255157E+01 0.1736245073E+02

geometry 5:

TOTAL ENERGY IS -16229.5526610 eV (-596.4229 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02

Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.6484832965E-01 0.1129774970E-01 0.1398653011E+02
 Pt 0.1111196907E-01 0.2779434222E+01 0.1396553739E+02
 Pt 0.3991889528E+01 -0.4316968436E-01 0.1413216761E+02
 Pt 0.3980285923E+01 0.2807776924E+01 0.1416116419E+02
 Pt 0.2146499068E+01 0.1280695872E+01 0.1561530893E+02
 Pt 0.2079764893E+01 0.4165072862E+01 0.1569063753E+02
 Pt 0.5645772679E+01 0.1412466904E+01 0.1584113260E+02
 Pt 0.6009572539E+01 0.4253633361E+01 0.1539563897E+02
 Pt -0.4617385942E-01 0.3994609450E-01 0.1664385282E+02
 Pt -0.4388721642E-01 0.2752652607E+01 0.1661050709E+02
 C 0.3822464610E+01 0.2235236150E+01 0.1618718487E+02
 C 0.3470908102E+01 0.3325628004E+01 0.1706741489E+02
 H 0.2970508209E+01 0.3025574154E+01 0.1799339816E+02
 H 0.4247575369E+01 0.4075806035E+01 0.1724091192E+02

geometry 6:

TOTAL ENERGY IS -16229.5246008 eV (-596.4219 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt -0.7881349912E-02 0.1206126245E-02 0.1397724331E+02
 Pt -0.6797569502E-02 0.2817794264E+01 0.1397623280E+02
 Pt 0.3957094544E+01 0.7030538225E-02 0.1422625969E+02
 Pt 0.3956610261E+01 0.2822429123E+01 0.1422985001E+02
 Pt 0.1957640101E+01 0.1412956668E+01 0.1542066312E+02
 Pt 0.1929081122E+01 0.4223549566E+01 0.1544529597E+02
 Pt 0.5930556254E+01 0.1425999647E+01 0.1541186181E+02
 Pt 0.5947109570E+01 0.4233868791E+01 0.1543427420E+02
 Pt -0.4928954749E-01 0.2430278572E-01 0.1677877990E+02
 Pt -0.5064598644E-01 0.2822907803E+01 0.1677032197E+02
 C -0.6191639940E+00 0.1426207563E+01 0.1806574701E+02
 C -0.1215973267E+01 0.1451851421E+01 0.1923690469E+02
 H -0.1497092846E+01 0.5368285323E+00 0.1974672167E+02
 H -0.1458650977E+01 0.2392410944E+01 0.1972548750E+02

geometry 7:

TOTAL ENERGY IS -16229.5111970 eV (-596.4214 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02

Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.3462948168E-01 0.1775780011E-01 0.1397439411E+02
 Pt 0.3519860463E-01 0.2819596288E+01 0.1397493354E+02
 Pt 0.4002780290E+01 0.2160077688E-01 0.1419661496E+02
 Pt 0.4002890062E+01 0.2824220113E+01 0.1420434761E+02
 Pt 0.2137710888E+01 0.1429614465E+01 0.1554773690E+02
 Pt 0.2062748823E+01 0.4240646339E+01 0.1543641934E+02
 Pt 0.6002403961E+01 0.1421341797E+01 0.1542616937E+02
 Pt 0.6033462893E+01 0.4244622067E+01 0.1542428611E+02
 Pt 0.7990436582E-01 0.3615586435E-02 0.1676442549E+02
 Pt 0.5509749004E-01 0.2857891220E+01 0.1673469785E+02
 C 0.1260048922E+01 0.1441131665E+01 0.1755252043E+02
 C 0.2030554613E+01 0.1560861589E+01 0.1864075303E+02
 H 0.2352221713E+01 0.7022989217E+00 0.1922373064E+02
 H 0.2343868471E+01 0.2539062731E+01 0.1898971706E+02

geometry 8:

TOTAL ENERGY IS -16229.5063153 eV (-596.4212 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.7365147130E-01 -0.2241870123E-01 0.1400058346E+02
 Pt 0.1163680471E-01 0.2807387377E+01 0.1396523801E+02
 Pt 0.3883812851E+01 0.1709866521E-02 0.1418187329E+02
 Pt 0.3929539864E+01 0.2825365761E+01 0.1426726570E+02
 Pt 0.1848860900E+01 0.1378868479E+01 0.1559331129E+02
 Pt 0.1869329212E+01 0.4360120459E+01 0.1574655576E+02
 Pt 0.5901724857E+01 0.1388391108E+01 0.1537985272E+02
 Pt 0.5920588880E+01 0.4263443928E+01 0.1537343972E+02
 Pt -0.2199687234E+00 0.5999408177E-01 0.1677778386E+02
 Pt -0.2051739733E+00 0.2836157268E+01 0.1670974697E+02
 C 0.3123785472E+01 0.2756526087E+01 0.1609619749E+02
 C 0.3270924379E+01 0.3527519638E+01 0.1723676168E+02
 H 0.4131288296E+01 0.4182581784E+01 0.1736024140E+02
 H 0.2771451855E+01 0.3209232080E+01 0.1814482007E+02

geometry 9:

TOTAL ENERGY IS -16229.4422738 eV (-596.4189 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01

Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt -0.2315851793E-02 0.1432512314E-01 0.1396286160E+02
 Pt 0.6143965979E-02 0.2806315655E+01 0.1397035296E+02
 Pt 0.3943036689E+01 0.7130890355E-02 0.1423784970E+02
 Pt 0.3936219181E+01 0.2818567881E+01 0.1430807014E+02
 Pt 0.1840465846E+01 0.1425172821E+01 0.1559970437E+02
 Pt 0.1894782358E+01 0.4237981412E+01 0.1543757612E+02
 Pt 0.6063500593E+01 0.1429205225E+01 0.1555002853E+02
 Pt 0.5991773629E+01 0.4237229234E+01 0.1543122675E+02
 Pt -0.4533136644E-01 -0.3327912930E-01 0.1679282579E+02
 Pt -0.4119910475E-01 0.2899567446E+01 0.1679116624E+02
 C 0.4107389696E+01 0.1358115972E+01 0.1577747612E+02
 C 0.3401400454E+01 0.1260642973E+01 0.1700754792E+02
 H 0.3438976529E+01 0.2098757561E+01 0.1769817762E+02
 H 0.3396989987E+01 0.2896000931E+00 0.1749885710E+02

8. Species: Ethynyl (C-CH) adsorbed on Pt110. The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1:

TOTAL ENERGY IS -16213.5410518 eV (-595.8345 hartree)

Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.2102817444E-01 -0.9920642611E-05 0.1402764489E+02
 Pt -0.7040977464E-02 0.2809344073E+01 0.1398095956E+02
 Pt 0.3949233793E+01 -0.9683793512E-03 0.1417503825E+02
 Pt 0.3967281665E+01 0.2808679548E+01 0.1406164655E+02
 Pt 0.2073691505E+01 0.1403918736E+01 0.1562705800E+02
 Pt 0.2076102368E+01 0.4207677694E+01 0.1562932340E+02
 Pt 0.5835779302E+01 0.1371699458E+01 0.1564342877E+02
 Pt 0.5832406686E+01 0.4242203193E+01 0.1564821971E+02
 Pt -0.2462600245E-01 -0.2237697641E-02 0.1668604675E+02
 Pt -0.3215301787E-01 0.2807942246E+01 0.1665626115E+02
 C 0.3224288826E+01 0.2801416707E+01 0.1668966281E+02
 C 0.4485364237E+01 0.2803751733E+01 0.1605859675E+02
 H 0.3107962217E+01 0.2800080637E+01 0.1777213696E+02

geometry 2:

TOTAL ENERGY IS -16213.0499629 eV (-595.8165 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.6605241817E-01 -0.2631249911E-02 0.1402970523E+02
 Pt -0.4076875998E-01 0.2762763944E+01 0.1396588246E+02
 Pt 0.3914089677E+01 -0.7053402866E-01 0.1415440460E+02
 Pt 0.3943403105E+01 0.2756092709E+01 0.1413263390E+02
 Pt 0.1970744703E+01 0.1220788691E+01 0.1568426817E+02
 Pt 0.1931511506E+01 0.4101750705E+01 0.1561150571E+02
 Pt 0.5589598295E+01 0.1264701715E+01 0.1586365551E+02
 Pt 0.5883929812E+01 0.4161827791E+01 0.1540016102E+02
 Pt -0.1936731856E+00 -0.9594103302E-01 0.1670468682E+02
 Pt -0.2031848036E+00 0.2676446846E+01 0.1662859986E+02
 C 0.2909998018E+01 0.2792031570E+01 0.1684271616E+02
 C 0.3874972648E+01 0.2177981030E+01 0.1609030291E+02
 H 0.2839476885E+01 0.2852442673E+01 0.1792273032E+02

geometry 3:

TOTAL ENERGY IS -16213.0222719 eV (-595.8154 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt -0.7338186046E-02 -0.2723402659E-01 0.1400735111E+02
 Pt -0.7522877494E-02 0.2797311447E+01 0.1401180595E+02
 Pt 0.4012289470E+01 -0.6332416635E-02 0.1418682280E+02
 Pt 0.4017158975E+01 0.2746056676E+01 0.1419534176E+02
 Pt 0.1909344470E+01 0.1365211294E+01 0.1539071317E+02
 Pt 0.2075397526E+01 0.4178103563E+01 0.1536465842E+02
 Pt 0.6022953491E+01 0.1342115433E+01 0.1547119516E+02
 Pt 0.5948724391E+01 0.4156818183E+01 0.1542758548E+02
 Pt -0.1768886280E+00 -0.5457940763E-01 0.1694438191E+02
 Pt -0.1561292757E+00 0.2672773830E+01 0.1693568852E+02
 C 0.6979102581E+00 0.4084450162E+01 0.1827414111E+02
 C 0.1419181010E+01 0.4156912110E+01 0.1717683333E+02
 H 0.7576187396E+00 0.4086333404E+01 0.1934758299E+02

geometry 4:

TOTAL ENERGY IS -16213.0011083 eV (-595.8147 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.4495554829E-01 0.4246660825E-03 0.1402050165E+02
 Pt -0.2627358948E-01 0.2763399024E+01 0.1397407426E+02
 Pt 0.3945171571E+01 -0.3459507204E-01 0.1413701795E+02
 Pt 0.3976199140E+01 0.2790536824E+01 0.1411859177E+02
 Pt 0.2000502462E+01 0.1186172762E+01 0.1562759816E+02
 Pt 0.1951639180E+01 0.4122792877E+01 0.1560953600E+02
 Pt 0.5668033966E+01 0.1327426925E+01 0.1577330846E+02
 Pt 0.5925467700E+01 0.4180450617E+01 0.1540791675E+02
 Pt -0.1311670673E+00 -0.9990579200E-01 0.1670750715E+02
 Pt -0.1109410065E+00 0.2681403450E+01 0.1664572102E+02
 C 0.4058765262E+01 0.1913310414E+01 0.1681114851E+02
 C 0.3282312648E+01 0.2730424626E+01 0.1604542039E+02
 H 0.3985609857E+01 0.1702418518E+01 0.1787249852E+02

geometry 5:

TOTAL ENERGY IS -16212.8804424 eV (-595.8102 hartree)
 Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.2312821006E-02 0.9004104379E-02 0.1400357854E+02
 Pt 0.1810093401E-03 0.2831600423E+01 0.1399773233E+02
 Pt 0.3995450946E+01 0.2831408321E-01 0.1420572843E+02
 Pt 0.3997434943E+01 0.2840652444E+01 0.1422183697E+02
 Pt 0.2011306926E+01 0.1435170661E+01 0.1539808287E+02
 Pt 0.2005542742E+01 0.4244692506E+01 0.1540610851E+02
 Pt 0.5972241511E+01 0.1427913320E+01 0.1542415310E+02
 Pt 0.5988465070E+01 0.4243490375E+01 0.1543285220E+02
 Pt 0.3512064877E-01 -0.6426479245E-01 0.1678798818E+02
 Pt 0.2386768413E-01 0.2821849605E+01 0.1675665565E+02
 C 0.2747737393E+00 0.4805799169E+00 0.1880050019E+02
 C 0.1893012076E+00 0.1613820991E+01 0.1822843834E+02
 H 0.4175238215E+00 -0.9376335944E-01 0.1969327567E+02

geometry 6:

TOTAL ENERGY IS -16212.8153955 eV (-595.8078 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.7683313883E-02 -0.4648516818E-01 0.1397311494E+02
 Pt 0.2831207913E-02 0.2787322379E+01 0.1401987461E+02
 Pt 0.4011132502E+01 -0.3290291489E-01 0.1417789153E+02
 Pt 0.4004753046E+01 0.2753026969E+01 0.1421161294E+02
 Pt 0.1955345687E+01 0.1402783652E+01 0.1537463018E+02
 Pt 0.2086057469E+01 0.4200165948E+01 0.1544943843E+02
 Pt 0.6034802499E+01 0.1266775805E+01 0.1544070032E+02
 Pt 0.5968899142E+01 0.4109803514E+01 0.1544691258E+02
 Pt 0.2459541384E-01 -0.4263753947E-01 0.1679837311E+02
 Pt -0.2143167138E+00 0.2594146568E+01 0.1694310957E+02
 C 0.9883261484E+00 0.3869198910E+01 0.1765769465E+02
 C 0.1948357950E+01 0.4759262955E+01 0.1748856303E+02
 H 0.2706791731E+01 0.5255421874E+01 0.1806975549E+02

geometry 7:

TOTAL ENERGY IS -16212.7999629 eV (-595.8073 hartree)
 Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt -0.4714311823E-02 0.5522062953E-01 0.1399630838E+02
 Pt -0.1032907716E-01 0.2847046751E+01 0.1397436487E+02
 Pt 0.4013360232E+01 0.8057372830E-01 0.1418512615E+02
 Pt 0.4023641854E+01 0.2907376772E+01 0.1417215261E+02
 Pt 0.2081661667E+01 0.1550141538E+01 0.1542618062E+02
 Pt 0.1975460780E+01 0.4365275890E+01 0.1536064743E+02
 Pt 0.5964336941E+01 0.1499148985E+01 0.1544986774E+02
 Pt 0.6011548839E+01 0.4298222827E+01 0.1546037863E+02
 Pt -0.1516135981E+00 0.3954741216E-01 0.1687375892E+02
 Pt -0.6761180369E-02 0.3017901849E+01 0.1678751710E+02
 C 0.1052545616E+01 0.1348047487E+01 0.1756918127E+02
 C 0.1967578747E+01 0.2284506640E+01 0.1742678078E+02
 H 0.2731730949E+01 0.2801719557E+01 0.1798251342E+02

geometry 8:

TOTAL ENERGY IS -16212.7038738 eV (-595.8037 hartree)
 Pt 0.1986250207E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250207E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.1404500281E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750572E+01 0.4213500809E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500365E+01 0.2809000528E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794157E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476357E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206622E+01 0.1409050861E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524422E+01 0.4209512029E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.7136791170E-02 0.4320917321E-02 0.1399063726E+02
 Pt -0.1396191244E-02 0.2837269600E+01 0.1401487335E+02
 Pt 0.3969824472E+01 -0.7327610044E-02 0.1416159101E+02
 Pt 0.3962436003E+01 0.2848137386E+01 0.1419228905E+02
 Pt 0.2020821768E+01 0.1340807529E+01 0.1537114071E+02
 Pt 0.1974354669E+01 0.4119102607E+01 0.1567558462E+02
 Pt 0.5943439858E+01 0.1501408826E+01 0.1543269387E+02
 Pt 0.5946103879E+01 0.4370980157E+01 0.1543212817E+02
 Pt -0.2204825405E-01 0.1551069336E+00 0.1681817904E+02
 Pt -0.5398976496E+00 0.3022560181E+01 0.1712493836E+02
 C 0.1358164005E+01 0.2726657613E+01 0.1695688574E+02
 C 0.1531781237E+01 0.1431156154E+01 0.1742399360E+02
 H 0.2177108885E+01 0.1092413116E+01 0.1822887618E+02

geometry 9:

TOTAL ENERGY IS -16212.6697369 eV (-595.8025 hartree)
 Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt -0.7141085937E-04 -0.8632850437E-02 0.1398384607E+02
 Pt -0.1476411205E-03 0.2839732155E+01 0.1401677595E+02
 Pt 0.3993291865E+01 0.5998287324E-02 0.1414484645E+02
 Pt 0.3974974868E+01 0.2863416140E+01 0.1417670621E+02
 Pt 0.2018952777E+01 0.1337577386E+01 0.1531460594E+02
 Pt 0.2082793731E+01 0.4197853899E+01 0.1568814818E+02
 Pt 0.5920931504E+01 0.1492827401E+01 0.1543184877E+02
 Pt 0.5945963062E+01 0.4363350080E+01 0.1545722619E+02
 Pt 0.5630546266E-02 0.1572040709E+00 0.1677370254E+02
 Pt -0.3521901688E+00 0.2999123506E+01 0.1692862604E+02
 C 0.1262744874E+01 0.1602100739E+01 0.1762349058E+02
 C 0.1626647269E+01 0.2655049914E+01 0.1681867110E+02
 H 0.1696010344E+01 0.1326946407E+01 0.1858022440E+02

geometry 10:

TOTAL ENERGY IS -16212.5213344 eV (-595.7970 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.3230120398E-01 0.1076969606E-01 0.1396077334E+02
 Pt 0.5607598025E-02 0.2817097586E+01 0.1399435585E+02
 Pt 0.3997746330E+01 0.1795784266E-01 0.1415554357E+02
 Pt 0.3996242238E+01 0.2824071802E+01 0.1416487753E+02
 Pt 0.2039808141E+01 0.1410760964E+01 0.1548399859E+02
 Pt 0.2036409399E+01 0.4262171043E+01 0.1547042770E+02
 Pt 0.5944533588E+01 0.1420885470E+01 0.1544505367E+02
 Pt 0.5942003788E+01 0.4227468979E+01 0.1544481393E+02
 Pt -0.5011535025E-01 0.1242240310E-01 0.1666390600E+02
 Pt -0.2370112017E+00 0.2820835072E+01 0.1689386133E+02
 C 0.1401002268E+01 0.2850310235E+01 0.1808878690E+02
 C 0.1917854483E+01 0.2848314460E+01 0.1687684643E+02
 H 0.1646228035E+01 0.2824911120E+01 0.1913547684E+02

geometry 11:

TOTAL ENERGY IS -16212.4155731 eV (-595.7932 hartree)
 Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.1059403300E-01 0.1493493433E-01 0.1395027618E+02
 Pt -0.3998270051E-02 0.2816620044E+01 0.1398881742E+02
 Pt 0.4000908237E+01 0.2856022504E-01 0.1413562693E+02
 Pt 0.3994907333E+01 0.2815578211E+01 0.1416961976E+02
 Pt 0.2050650830E+01 0.1409016223E+01 0.1551515160E+02
 Pt 0.2065713198E+01 0.4290174910E+01 0.1540873719E+02
 Pt 0.5918541023E+01 0.1396063279E+01 0.1545003872E+02
 Pt 0.5910969407E+01 0.4195582744E+01 0.1546883052E+02
 Pt -0.9296310061E-01 -0.3110346036E-01 0.1664395258E+02
 Pt -0.1572117696E+00 0.2793314060E+01 0.1681452604E+02
 C 0.1854716508E+01 0.2052965817E+01 0.1751044200E+02
 C 0.1834309411E+01 0.3291552817E+01 0.1703047268E+02
 H 0.2143144032E+01 0.1564326903E+01 0.1842502475E+02

geometry 12:

TOTAL ENERGY IS -16212.3696331 eV (-595.7915 hartree)
 Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.4768879246E-01 0.2340821226E-01 0.1395687890E+02
 Pt 0.1145013910E-01 0.2817989332E+01 0.1397931529E+02
 Pt 0.4019002521E+01 -0.1060577189E-01 0.1413718582E+02
 Pt 0.4012264118E+01 0.2806520286E+01 0.1416265352E+02
 Pt 0.2191579841E+01 0.1296002416E+01 0.1559558064E+02
 Pt 0.2087528782E+01 0.4194652986E+01 0.1550182046E+02
 Pt 0.5933589612E+01 0.1441113464E+01 0.1547212572E+02
 Pt 0.5935665708E+01 0.4258352152E+01 0.1545401141E+02
 Pt -0.3339391832E-01 0.5385157378E-01 0.1662421800E+02
 Pt -0.1149214399E+00 0.2871027500E+01 0.1674979435E+02
 C 0.2552442599E+01 0.1932911673E+01 0.1750038263E+02
 C 0.1864227896E+01 0.2964156677E+01 0.1707203558E+02
 H 0.3077967150E+01 0.1490197239E+01 0.1832964302E+02

geometry 13:

TOTAL ENERGY IS -16212.3441852 eV (-595.7905 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.7964344513E-01 0.1003885356E-01 0.1398721381E+02
 Pt 0.5560459671E-02 0.2816676423E+01 0.1401506986E+02
 Pt 0.3947547450E+01 0.1897072001E-01 0.1415872519E+02
 Pt 0.3971897944E+01 0.2829276797E+01 0.1414346258E+02
 Pt 0.2036651464E+01 0.1443280662E+01 0.1556376917E+02
 Pt 0.2027009492E+01 0.4243787412E+01 0.1555282501E+02
 Pt 0.5907484260E+01 0.1426323827E+01 0.1542351475E+02
 Pt 0.5912848250E+01 0.4249536226E+01 0.1541725017E+02
 Pt -0.1155971587E+00 0.3997358730E-01 0.1667986480E+02
 Pt -0.3260802941E+00 0.2838874614E+01 0.1690867729E+02
 C 0.1484238767E+01 0.2865310668E+01 0.1742055019E+02
 C 0.2740714547E+01 0.2858040296E+01 0.1701784685E+02
 H 0.3725429475E+01 0.2849575251E+01 0.1745687210E+02

geometry 14:

TOTAL ENERGY IS -16212.1403867 eV (-595.7830 hartree)
Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
Pt 0.1511369990E-01 0.4052577508E-02 0.1398578768E+02
Pt 0.3419270539E-01 0.2818927346E+01 0.1399689006E+02
Pt 0.3950608460E+01 -0.5788859057E-01 0.1417564241E+02
Pt 0.3913514501E+01 0.2757786400E+01 0.1434183308E+02
Pt 0.1751321785E+01 0.1432668352E+01 0.1564088928E+02
Pt 0.1925334938E+01 0.4250253123E+01 0.1550929695E+02
Pt 0.6109391973E+01 0.1422495903E+01 0.1553004259E+02
Pt 0.5989122837E+01 0.4216597396E+01 0.1541467724E+02
Pt -0.8688347648E-01 -0.5310328153E-01 0.1685378778E+02
Pt -0.7164193660E-01 0.2931764399E+01 0.1684508628E+02
C 0.3293360730E+01 0.9852662478E+00 0.1675840180E+02
C 0.4199577787E+01 0.1234638569E+01 0.1579088141E+02
H 0.3379252672E+01 0.6722123413E+00 0.1778791898E+02

geometry 15:

TOTAL ENERGY IS -16211.9792627 eV (-595.7771 hartree)
Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
Pt 0.4928491730E-02 -0.2319054380E-01 0.1395139639E+02
Pt -0.2591148843E-01 0.2791223554E+01 0.1396439411E+02
Pt 0.4099174648E+01 -0.6291164705E-01 0.1416871213E+02
Pt 0.4101473416E+01 0.2739272291E+01 0.1463413983E+02
Pt 0.1949499099E+01 0.1217067149E+01 0.1535360083E+02
Pt 0.1969341314E+01 0.4224243571E+01 0.1532907523E+02
Pt 0.6148917655E+01 0.1319818369E+01 0.1554366077E+02
Pt 0.6096250027E+01 0.4183229619E+01 0.1553811839E+02
Pt 0.4053130661E-01 -0.8380642724E-01 0.1681794366E+02
Pt 0.1668573289E+00 0.2740404366E+01 0.1686154206E+02
C 0.2168046645E+01 0.2899984652E+01 0.1678378197E+02
C 0.3341460929E+01 0.2211524667E+01 0.1652914498E+02
H 0.4024194456E+01 0.1716706787E+01 0.1720411117E+02

9. Species: Carbodic carbon (C-C) adsorbed on Pt110. The species are numbered according to their stability. From 1, the most stable to 2, the second most stable and so on...

geometry 1:

TOTAL ENERGY IS -16196.5805172 eV (-595.2112 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.7825950963E-02 0.1956175034E-01 0.1403280204E+02
 Pt 0.6651923570E-02 0.2828122013E+01 0.1397848508E+02
 Pt 0.3993267698E+01 0.2206404692E-01 0.1415945000E+02
 Pt 0.3978294032E+01 0.2828170826E+01 0.1401377342E+02
 Pt 0.2044409014E+01 0.1424378966E+01 0.1558708390E+02
 Pt 0.2045346260E+01 0.4325524834E+01 0.1560009141E+02
 Pt 0.5938115972E+01 0.1415071642E+01 0.1559723249E+02
 Pt 0.5945610715E+01 0.4316420161E+01 0.1559995509E+02
 Pt 0.2331576730E-01 0.6753693221E-01 0.1674530765E+02
 Pt 0.2598697085E-01 0.2873657929E+01 0.1670344268E+02
 C 0.3301158908E+01 0.2877004082E+01 0.1608237537E+02
 C 0.4680924620E+01 0.2872274014E+01 0.1608005229E+02

geometry 2:

TOTAL ENERGY IS -16196.1434670 eV (-595.1952 hartree)
 Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt -0.6119542695E-02 0.3037767368E-02 0.1397670860E+02
 Pt -0.4606278343E-02 0.2810675369E+01 0.1402033736E+02
 Pt 0.3967603936E+01 0.1350679109E-01 0.1402005901E+02
 Pt 0.3962263780E+01 0.2822038693E+01 0.1408564197E+02
 Pt 0.2151974309E+01 0.1471807045E+01 0.1568632002E+02
 Pt 0.2150956441E+01 0.4203166885E+01 0.1569215173E+02
 Pt 0.5759103039E+01 0.1473333797E+01 0.1569276869E+02
 Pt 0.5759234726E+01 0.4202255656E+01 0.1569659891E+02
 Pt -0.1759532715E-01 0.3217198117E-01 0.1659861635E+02

Pt -0.1941544045E-01 0.2837827205E+01 0.1667074951E+02
 C 0.3955109375E+01 -0.6712852959E+00 0.1616061186E+02
 C 0.3955452743E+01 0.7218049188E+00 0.1615565486E+02

geometry 3:

TOTAL ENERGY IS -16195.3285038 eV (-595.1652 hartree)
 Pt 0.1986250000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.1986250000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.1404500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.5958750000E+01 0.4213500000E+01 0.9832000000E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.0000000000E+00 0.1123659952E+02
 Pt 0.3972500000E+01 0.2809000000E+01 0.1123659952E+02
 Pt 0.2034793950E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.2034476150E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.5910206050E+01 0.1409050580E+01 0.1263333344E+02
 Pt 0.5910523850E+01 0.4209511220E+01 0.1263254688E+02
 Pt 0.3491885347E-01 0.9708865936E-02 0.1399772913E+02
 Pt 0.1445375893E-01 0.2849147322E+01 0.1399567991E+02
 Pt 0.3980078685E+01 0.2538159264E-01 0.1414012170E+02
 Pt 0.3992753169E+01 0.2884608716E+01 0.1416913513E+02
 Pt 0.2048735309E+01 0.1381568668E+01 0.1534402367E+02
 Pt 0.2113433827E+01 0.4199292993E+01 0.1570361638E+02
 Pt 0.5933499314E+01 0.1508116026E+01 0.1542687341E+02
 Pt 0.5960539649E+01 0.4385950299E+01 0.1544491992E+02
 Pt -0.4931564953E-01 0.1290786665E+00 0.1683898237E+02
 Pt -0.2879106571E+00 0.3037670758E+01 0.1685850419E+02
 C 0.1208198564E+01 0.1570004963E+01 0.1738941242E+02
 C 0.1779330873E+01 0.2717726747E+01 0.1700758417E+02

geometry 4:

TOTAL ENERGY IS -16195.2641803 eV (-595.1629 hartree)
 Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt -0.2832191147E-01 -0.8246320221E-01 0.1401546544E+02
 Pt -0.2116611801E-01 0.2755703475E+01 0.1400551431E+02
 Pt 0.4085507455E+01 0.8447439388E-01 0.1440678259E+02
 Pt 0.3945376898E+01 0.2912194630E+01 0.1399742118E+02
 Pt 0.1901508273E+01 0.1326909969E+01 0.1558646954E+02
 Pt 0.1981495050E+01 0.4169345003E+01 0.1540706354E+02
 Pt 0.6257224120E+01 0.1210348462E+01 0.1570979176E+02
 Pt 0.5954561173E+01 0.4119290487E+01 0.1573017962E+02
 Pt 0.1536094765E+00 -0.1976652747E+00 0.1690393769E+02
 Pt 0.1383161068E+00 0.2771192173E+01 0.1687369701E+02
 C 0.3775263513E+01 0.1757227453E+01 0.1572175186E+02

C 0.4848293525E+01 0.2519826433E+01 0.1607491662E+02

geometry 5:

TOTAL ENERGY IS -16195.1224337 eV (-595.1576 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt -0.9099419129E-02 0.2598353823E-01 0.1400540912E+02
 Pt -0.8080719308E-02 0.2822971345E+01 0.1400991874E+02
 Pt 0.4007471639E+01 0.5949768428E-02 0.1415200289E+02
 Pt 0.4011045572E+01 0.2867175537E+01 0.1415969724E+02
 Pt 0.2123885611E+01 0.1437213809E+01 0.1537748807E+02
 Pt 0.1947243284E+01 0.4252392909E+01 0.1539645944E+02
 Pt 0.5925583597E+01 0.1446772013E+01 0.1540764085E+02
 Pt 0.5962959098E+01 0.4260333735E+01 0.1544377092E+02
 Pt -0.1365520498E+00 0.4824488452E-02 0.1684085522E+02
 Pt -0.1178885559E+00 0.2937310173E+01 0.1683799245E+02
 C 0.5763792284E+00 0.1474317462E+01 0.1815094181E+02
 C 0.1496124357E+01 0.1446638285E+01 0.1719648448E+02

geometry 6:

TOTAL ENERGY IS -16195.1204858 eV (-595.1576 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt -0.1116593531E-02 -0.2204205042E-01 0.1401409323E+02
 Pt -0.9038500694E-03 0.2795349676E+01 0.1401610602E+02
 Pt 0.4009829673E+01 -0.4154840467E-03 0.1417169059E+02
 Pt 0.4014171458E+01 0.2752219995E+01 0.1417664249E+02
 Pt 0.1947906761E+01 0.1372696722E+01 0.1540308378E+02
 Pt 0.2120772842E+01 0.4188425266E+01 0.1538213593E+02
 Pt 0.5978557187E+01 0.1352907387E+01 0.1545707567E+02
 Pt 0.5940289892E+01 0.4169912854E+01 0.1541939616E+02
 Pt -0.1233081738E+00 -0.1276830082E-01 0.1687103236E+02
 Pt -0.1066627427E+00 0.2675889081E+01 0.1685224682E+02
 C 0.6034258965E+00 0.4112327226E+01 0.1817967322E+02
 C 0.1503181427E+01 0.4180627402E+01 0.1720636608E+02

geometry 7:

TOTAL ENERGY IS -16194.6369816 eV (-595.1398 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.4900066051E-01 0.1036566982E-02 0.1396059972E+02
 Pt 0.1137068877E-01 0.2816310082E+01 0.1398382231E+02
 Pt 0.3984609413E+01 0.1227793750E-01 0.1414576872E+02
 Pt 0.4002531093E+01 0.2832810458E+01 0.1414815308E+02
 Pt 0.2071602479E+01 0.1390011525E+01 0.1545797673E+02
 Pt 0.2078154199E+01 0.4243784335E+01 0.1551943166E+02
 Pt 0.5923344733E+01 0.1416982706E+01 0.1543233924E+02
 Pt 0.5938483949E+01 0.4246000885E+01 0.1543653892E+02
 Pt -0.4008469600E-01 0.3418791920E-01 0.1664670624E+02
 Pt -0.1963256404E+00 0.2829891940E+01 0.1677832597E+02
 C 0.1366053233E+01 0.2547057082E+01 0.1802690374E+02
 C 0.2019337178E+01 0.2800424799E+01 0.1688284968E+02

geometry 8:

TOTAL ENERGY IS -16194.6359177 eV (-595.1398 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt -0.1228754211E-01 -0.6194951910E-02 0.1394885904E+02
 Pt -0.4514107119E-01 0.2803695726E+01 0.1398358415E+02
 Pt 0.4083211937E+01 -0.3322188342E-02 0.1418855991E+02
 Pt 0.4189421526E+01 0.2807426369E+01 0.1447454629E+02
 Pt 0.1898494370E+01 0.1283369925E+01 0.1537536006E+02
 Pt 0.1900817607E+01 0.4320492381E+01 0.1537485749E+02
 Pt 0.6104615991E+01 0.1375077522E+01 0.1559901047E+02
 Pt 0.6098902585E+01 0.4246907381E+01 0.1559603331E+02
 Pt 0.1059709430E-01 0.1846671813E-02 0.1688744365E+02
 Pt 0.9481467103E-01 0.2808192595E+01 0.1693851074E+02
 C 0.2083136218E+01 0.2854723050E+01 0.1697691756E+02
 C 0.3122856233E+01 0.2772754298E+01 0.1614418919E+02

geometry 9:

TOTAL ENERGY IS -16194.5461965 eV (-595.1365 hartree)

Pt 0.1986250143E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.1986250143E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.1404500236E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.5958750381E+01 0.4213500674E+01 0.9832001298E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.0000000000E+00 0.1123660105E+02
 Pt 0.3972500238E+01 0.2809000438E+01 0.1123660105E+02
 Pt 0.2034794093E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.2034476293E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.5910206431E+01 0.1409050816E+01 0.1263333515E+02
 Pt 0.5910524231E+01 0.4209511894E+01 0.1263254859E+02
 Pt 0.4840106479E-02 0.1718572830E-01 0.1396979990E+02
 Pt 0.4783482215E-02 0.2847399755E+01 0.1399657226E+02
 Pt 0.3998541281E+01 0.4690323394E-01 0.1425524852E+02
 Pt 0.3991005213E+01 0.2845970105E+01 0.1423575723E+02
 Pt 0.1961984200E+01 0.1442607232E+01 0.1540647740E+02
 Pt 0.1971624252E+01 0.4247286792E+01 0.1540718164E+02
 Pt 0.6006028700E+01 0.1445057376E+01 0.1545511364E+02
 Pt 0.6005093790E+01 0.4236159742E+01 0.1542855467E+02
 Pt 0.1107843936E-01 -0.2709800390E-01 0.1676245037E+02
 Pt 0.1292335378E-01 0.2897199594E+01 0.1681412698E+02
 C 0.1629263078E+00 0.1175381360E+01 0.1821565549E+02
 C 0.2410419978E+00 0.2359112081E+01 0.1875231373E+02

geometry 10:

TOTAL ENERGY IS -16194.4196872 eV (-595.1318 hartree)
 Pt 0.1986250167E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.1986250167E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.1404500275E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.5958750445E+01 0.4213500787E+01 0.9832001514E+01
 Pt 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.0000000000E+00 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.0000000000E+00 0.1123660131E+02
 Pt 0.3972500278E+01 0.2809000511E+01 0.1123660131E+02
 Pt 0.2034794117E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.2034476317E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5910206495E+01 0.1409050855E+01 0.1263333543E+02
 Pt 0.5910524295E+01 0.4209512007E+01 0.1263254887E+02
 Pt 0.5332962753E-01 0.1465732266E-01 0.1396697919E+02
 Pt 0.1149350890E-02 0.2816793017E+01 0.1398853597E+02
 Pt 0.3983398962E+01 0.3598987615E-01 0.1411577647E+02
 Pt 0.4000548297E+01 0.2833304478E+01 0.1413243046E+02
 Pt 0.2070497847E+01 0.1425372483E+01 0.1553341392E+02
 Pt 0.2087910120E+01 0.4298920373E+01 0.1548109308E+02
 Pt 0.5903053366E+01 0.1428404394E+01 0.1542303400E+02
 Pt 0.5919183882E+01 0.4244294849E+01 0.1542127795E+02
 Pt -0.8888227998E-01 0.3350236509E-01 0.1664974996E+02
 Pt -0.2336481316E+00 0.2865638012E+01 0.1680928644E+02
 C 0.1628542200E+01 0.2615624649E+01 0.1724165390E+02
 C 0.2842526221E+01 0.3045476011E+01 0.1693959804E+02