

Electronic Supplementary Information

for

A first principles study of CO₂ adsorption on α -SiO₂(001) surfaces

Oleksandr I. Malyi^{1*}, Priyadarshini Thiyam², Mathias Boström¹, and Clas Persson¹⁻³

1 – Centre for Materials Science and Nanotechnology, University of Oslo, P. O. Box 1048
Blindern, NO-0316 Oslo, Norway

2 – Department of Materials Science and Engineering, Royal Institute of Technology, SE-100
44 Stockholm, Sweden

3 – Department of Physics, University of Oslo, P. O. Box 1048 Blindern, NO-0316 Oslo,
Norway

Email: oleksandr.malyi@smn.uio.no (O.I.M*)

Table S1. Monkhorst-Pack grids used in this work

system	type of calculations	size
Bulk α -SiO ₂	“static” DFT	7×7×7
Unit cell slab	“static” DFT	7×7×1
2×2 supercell slab	“static” DFT	3×3×1
All systems	BOMD	single Γ -point

Visualization

The visualization of computed structures was made by VESTA software.¹

Screening calculations

To find adsorption sites for CO₂ molecules, over 50 initial adsorption configurations for each surface (all initial configurations were generated based on a uniform grid) were screened. Then, a few lowest energy configurations were optimized with the final computational setup. To ensure that the screening methodology can provide reliable results, comparison of the binding energies for the screening and final “static” DFT setups was performed. The largest difference was computed to be 0.06 eV

To predict the lowest energy CO₂ configurations at reconstructed surfaces for higher CO₂ concentrations (monolayer coverage), BOMD simulations using the optB86b-vdW functional at 50 K were performed for randomly distributed molecules at the surfaces. During the simulations, 8 configurations (one configuration taken every 0.75 ps) for each surface were generated and further optimized using “static” DFT calculations. It should be noted that key BOMD simulations (e.g. generation of “dense” and reoptimized “dense” surfaces) were also performed using higher cutoff energy (400 eV) to confirm that the results were not affected by the computational setup.

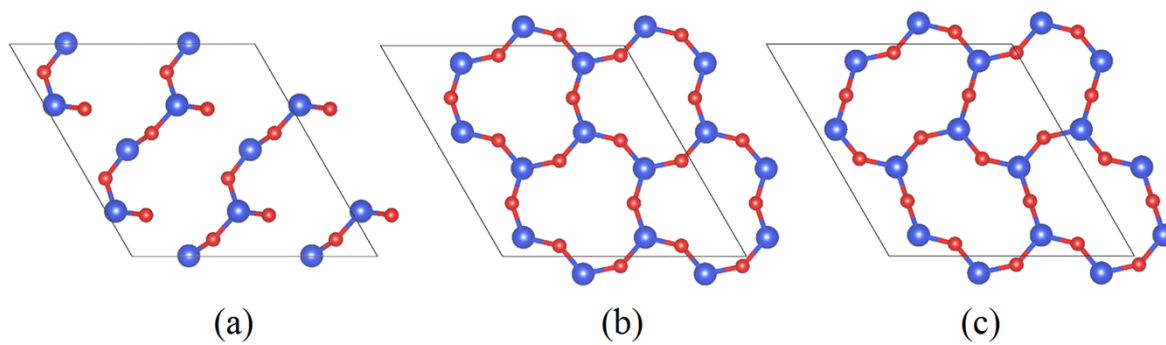


Fig. S1 Top view of (a) cleaved, (b) “dense”, and (c) reoptimized “dense” α -SiO₂(001) surfaces.

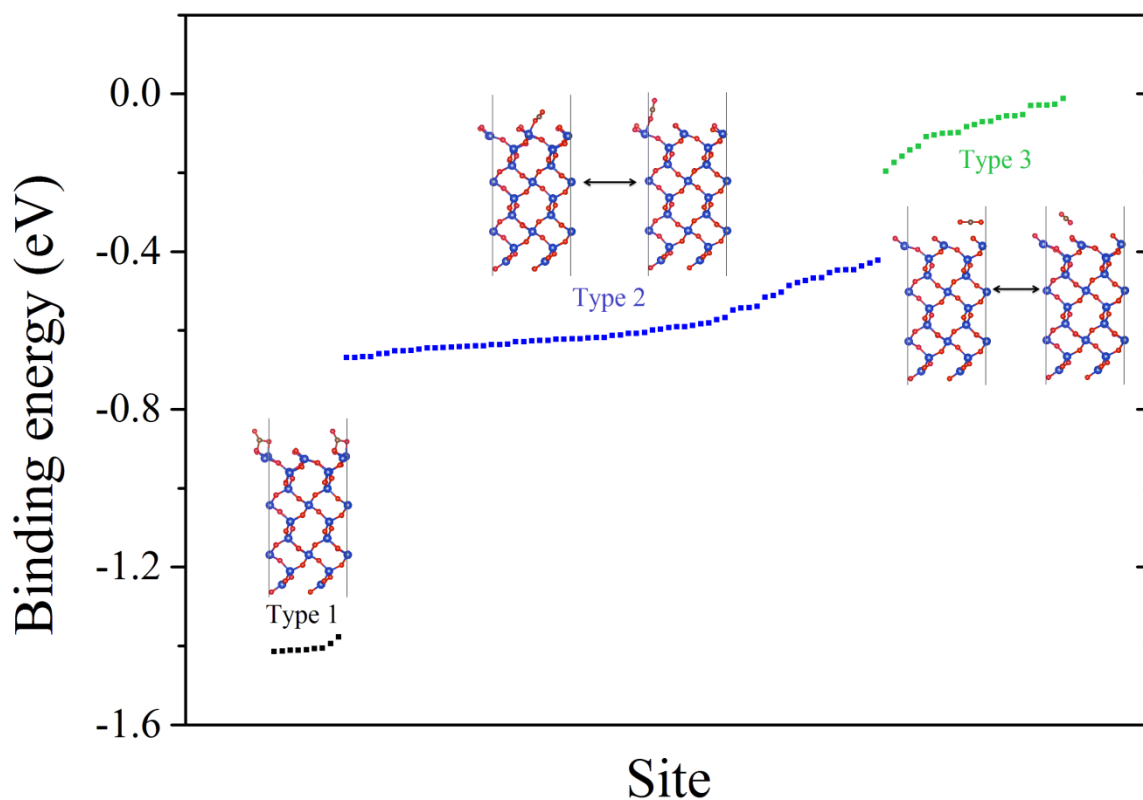


Fig. S2. Results for screening calculations for adsorption of single CO₂ molecule on cleaved α -SiO₂(001) surface. Each point corresponds to single calculation. For configurations of the Type 2 and Type 3, the lowest and highest energy configurations are shown. For the Type 1 configurations, the visual difference between different configurations is not significant and hence only one configuration is shown. Different binding energies come from the minor modifications of the configurations (e.g. change of distance to the surface, rotation of the molecule, etc.). For the final “*static*” calculations only the lowest energy structures of each type were used.

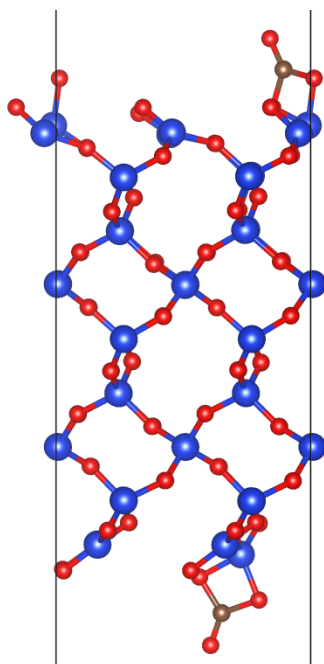


Fig. S3 Lateral view of the system containing two CO₂ molecules adsorbed at CO3-1 configurations. The system was used for BOMD simulation for the search of reconstruction in CO₂-α-SiO₂ system.

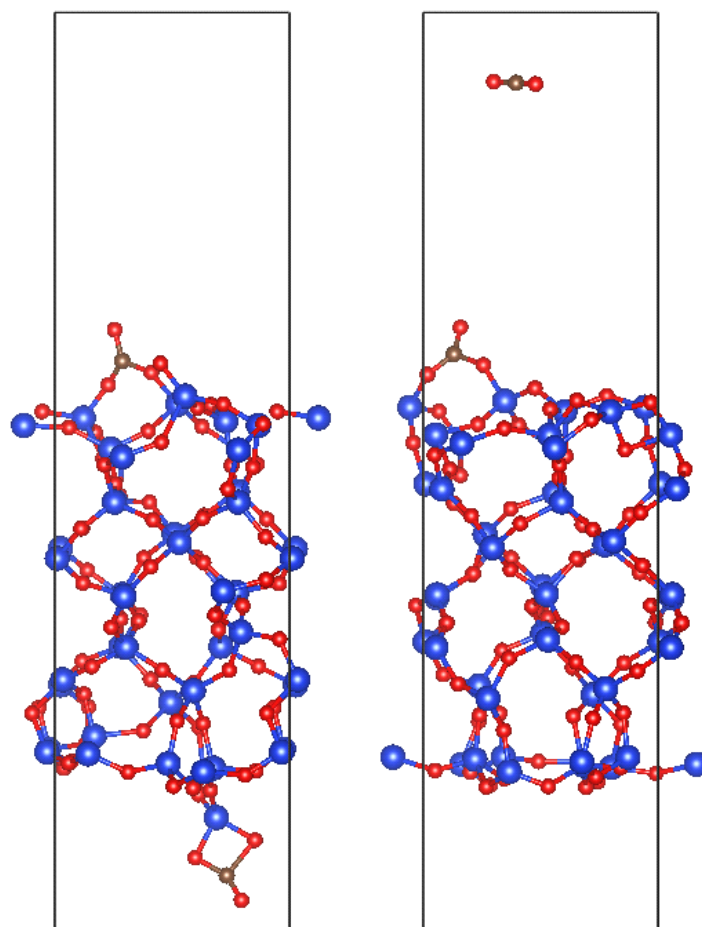


Fig. S4. Initial (left figure) and final (right figure) structures observed from BOMD simulations of CO3-1 stability for energy profile shown in Fig. 1e. During the BOMD simulation, one CO₂ molecule desorbs from the surface. The desorption of the second molecule was not observed.

References

1. K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, 2011, 44, 1272-1276.

Structures

dense surface (optB86b-vdW)

_cell_length_a 9.80
_cell_length_b 9.80
_cell_length_c 28.089
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120
_symmetry_space_group_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number '1'
_symmetry_cell_setting 'triclinic'
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z

loop_

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
O1 O 1.0000 0.06496 0.36891 0.32373 0.0000
O2 O 1.0000 0.06496 0.86891 0.32373 0.0000
O3 O 1.0000 0.56496 0.36891 0.32373 0.0000
O4 O 1.0000 0.56496 0.86891 0.32373 0.0000
O5 O 1.0000 0.19608 0.13115 0.27628 0.0000
O6 O 1.0000 0.19608 0.63115 0.27628 0.0000
O7 O 1.0000 0.69608 0.13115 0.27628 0.0000
O8 O 1.0000 0.69608 0.63115 0.27628 0.0000
O9 O 1.0000 0.36535 0.07051 0.34148 0.0000
O10 O 1.0000 0.36535 0.57051 0.34148 0.0000
O11 O 1.0000 0.86535 0.07051 0.34148 0.0000
O12 O 1.0000 0.86535 0.57051 0.34148 0.0000
O13 O 1.0000 0.29480 0.42951 0.25851 0.0000
O14 O 1.0000 0.29480 0.92951 0.25851 0.0000
O15 O 1.0000 0.79480 0.42951 0.25851 0.0000
O16 O 1.0000 0.79480 0.92951 0.25851 0.0000
O17 O 1.0000 0.15076 0.22014 0.38406 0.0000
O18 O 1.0000 0.15076 0.72014 0.38406 0.0000
O19 O 1.0000 0.65076 0.22014 0.38406 0.0000
O20 O 1.0000 0.65076 0.72014 0.38406 0.0000
O21 O 1.0000 0.43058 0.27989 0.21593 0.0000
O22 O 1.0000 0.43058 0.77989 0.21593 0.0000
O23 O 1.0000 0.93058 0.27989 0.21593 0.0000
O24 O 1.0000 0.93058 0.77989 0.21593 0.0000
O25 O 1.0000 0.42842 0.27533 0.41087 0.0000
O26 O 1.0000 0.42842 0.77533 0.41087 0.0000
O27 O 1.0000 0.92842 0.27533 0.41087 0.0000
O28 O 1.0000 0.92842 0.77533 0.41087 0.0000
O29 O 1.0000 0.15301 0.22461 0.18914 0.0000
O30 O 1.0000 0.15301 0.72461 0.18914 0.0000
O31 O 1.0000 0.65301 0.22461 0.18914 0.0000
O32 O 1.0000 0.65301 0.72461 0.18914 0.0000
O33 O 1.0000 0.29964 0.39900 0.46425 0.0000
O34 O 1.0000 0.29964 0.89900 0.46425 0.0000
O35 O 1.0000 0.79964 0.39900 0.46425 0.0000
O36 O 1.0000 0.79964 0.89900 0.46425 0.0000
O37 O 1.0000 0.40057 0.10097 0.13576 0.0000

O38	O	1.0000	0.40057	0.60097	0.13576	0.0000
O39	O	1.0000	0.90057	0.10097	0.13576	0.0000
O40	O	1.0000	0.90057	0.60097	0.13576	0.0000
O41	O	1.0000	0.16762	0.09416	0.46495	0.0000
O42	O	1.0000	0.16762	0.59416	0.46495	0.0000
O43	O	1.0000	0.66762	0.09416	0.46495	0.0000
O44	O	1.0000	0.66762	0.59416	0.46495	0.0000
O45	O	1.0000	0.07345	0.40580	0.13505	0.0000
O46	O	1.0000	0.07345	0.90580	0.13505	0.0000
O47	O	1.0000	0.57345	0.40580	0.13505	0.0000
O48	O	1.0000	0.57345	0.90580	0.13505	0.0000
O49	O	1.0000	0.18183	0.24255	0.54577	0.0000
O50	O	1.0000	0.18183	0.74255	0.54577	0.0000
O51	O	1.0000	0.68183	0.24255	0.54577	0.0000
O52	O	1.0000	0.68183	0.74255	0.54577	0.0000
O53	O	1.0000	0.43923	0.25744	0.05423	0.0000
O54	O	1.0000	0.43923	0.75744	0.05423	0.0000
O55	O	1.0000	0.93923	0.25744	0.05423	0.0000
O56	O	1.0000	0.93923	0.75744	0.05423	0.0000
O57	O	1.0000	0.48771	0.43277	0.53813	0.0000
O58	O	1.0000	0.48771	0.93277	0.53813	0.0000
O59	O	1.0000	0.98771	0.43277	0.53813	0.0000
O60	O	1.0000	0.98771	0.93277	0.53813	0.0000
O61	O	1.0000	0.05489	0.06723	0.06189	0.0000
O62	O	1.0000	0.05489	0.56723	0.06189	0.0000
O63	O	1.0000	0.55489	0.06723	0.06189	0.0000
O64	O	1.0000	0.55489	0.56723	0.06189	0.0000
O65	O	1.0000	0.29650	0.05062	0.54250	0.0000
O66	O	1.0000	0.29650	0.55062	0.54250	0.0000
O67	O	1.0000	0.79650	0.05062	0.54250	0.0000
O68	O	1.0000	0.79650	0.55062	0.54250	0.0000
O69	O	1.0000	0.24584	0.44939	0.05749	0.0000
O70	O	1.0000	0.24584	0.94939	0.05749	0.0000
O71	O	1.0000	0.74584	0.44939	0.05749	0.0000
O72	O	1.0000	0.74584	0.94939	0.05749	0.0000
Si1	Si	1.0000	0.23103	0.00002	0.30000	0.0000
Si2	Si	1.0000	0.23103	0.50002	0.30000	0.0000
Si3	Si	1.0000	0.73103	0.00002	0.30000	0.0000
Si4	Si	1.0000	0.73103	0.50002	0.30000	0.0000
Si5	Si	1.0000	0.00152	0.23366	0.36488	0.0000
Si6	Si	1.0000	0.00152	0.73366	0.36488	0.0000
Si7	Si	1.0000	0.50152	0.23366	0.36488	0.0000
Si8	Si	1.0000	0.50152	0.73366	0.36488	0.0000
Si9	Si	1.0000	0.26783	0.26636	0.23512	0.0000
Si10	Si	1.0000	0.26783	0.76636	0.23512	0.0000
Si11	Si	1.0000	0.76783	0.26636	0.23512	0.0000
Si12	Si	1.0000	0.76783	0.76636	0.23512	0.0000
Si13	Si	1.0000	0.26049	0.24759	0.43040	0.0000
Si14	Si	1.0000	0.26049	0.74759	0.43040	0.0000
Si15	Si	1.0000	0.76049	0.24759	0.43040	0.0000
Si16	Si	1.0000	0.76049	0.74759	0.43040	0.0000
Si17	Si	1.0000	0.01285	0.25239	0.16960	0.0000
Si18	Si	1.0000	0.01285	0.75239	0.16960	0.0000
Si19	Si	1.0000	0.51285	0.25239	0.16960	0.0000
Si20	Si	1.0000	0.51285	0.75239	0.16960	0.0000
Si21	Si	1.0000	0.31708	0.40740	0.52266	0.0000
Si22	Si	1.0000	0.31708	0.90740	0.52266	0.0000
Si23	Si	1.0000	0.81708	0.40740	0.52266	0.0000
Si24	Si	1.0000	0.81708	0.90740	0.52266	0.0000
Si25	Si	1.0000	0.40963	0.09259	0.07734	0.0000

Si26	Si	1.0000	0.40963	0.59259	0.07734	0.0000
Si27	Si	1.0000	0.90963	0.09259	0.07734	0.0000
Si28	Si	1.0000	0.90963	0.59259	0.07734	0.0000
Si29	Si	1.0000	0.15686	0.07925	0.52306	0.0000
Si30	Si	1.0000	0.15686	0.57925	0.52306	0.0000
Si31	Si	1.0000	0.65686	0.07925	0.52306	0.0000
Si32	Si	1.0000	0.65686	0.57925	0.52306	0.0000
Si33	Si	1.0000	0.07757	0.42074	0.07694	0.0000
Si34	Si	1.0000	0.07757	0.92074	0.07694	0.0000
Si35	Si	1.0000	0.57757	0.42074	0.07694	0.0000
Si36	Si	1.0000	0.57757	0.92074	0.07694	0.0000

reoptimized dense (optB86b-vdW)

_cell_length_a 9.80
_cell_length_b 9.80
_cell_length_c 28.089
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120
_symmetry_space_group_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number '1'
_symmetry_cell_setting 'triclinic'
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z

loop_

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
O1 O 1.0000 0.11660 0.37374 0.33124 0.0000
O2 O 1.0000 0.05588 0.90730 0.32638 0.0000
O3 O 1.0000 0.61671 0.39237 0.33533 0.0000
O4 O 1.0000 0.54921 0.90017 0.32497 0.0000
O5 O 1.0000 0.17714 0.10191 0.25630 0.0000
O6 O 1.0000 0.23451 0.60146 0.27033 0.0000
O7 O 1.0000 0.68557 0.07774 0.25162 0.0000
O8 O 1.0000 0.73496 0.57731 0.26202 0.0000
O9 O 1.0000 0.36450 0.10818 0.32807 0.0000
O10 O 1.0000 0.41616 0.59703 0.34230 0.0000
O11 O 1.0000 0.85864 0.09383 0.32907 0.0000
O12 O 1.0000 0.92091 0.60329 0.33777 0.0000
O13 O 1.0000 0.34848 0.40538 0.27188 0.0000
O14 O 1.0000 0.26106 0.88360 0.26668 0.0000
O15 O 1.0000 0.82915 0.37240 0.27833 0.0000
O16 O 1.0000 0.75397 0.85366 0.27305 0.0000
O17 O 1.0000 0.06979 0.16603 0.39749 0.0000
O18 O 1.0000 0.07710 0.80158 0.41160 0.0000
O19 O 1.0000 0.57340 0.17086 0.39656 0.0000
O20 O 1.0000 0.58301 0.80921 0.41138 0.0000
O21 O 1.0000 0.45233 0.25638 0.21536 0.0000
O22 O 1.0000 0.40398 0.79930 0.20229 0.0000
O23 O 1.0000 0.96281 0.26948 0.21588 0.0000
O24 O 1.0000 0.90617 0.80366 0.20199 0.0000
O25 O 1.0000 0.38456 0.29750 0.39767 0.0000
O26 O 1.0000 0.30287 0.75724 0.38390 0.0000
O27 O 1.0000 0.88750 0.29898 0.39471 0.0000
O28 O 1.0000 0.80198 0.75403 0.38293 0.0000
O29 O 1.0000 0.22895 0.31087 0.18508 0.0000
O30 O 1.0000 0.08831 0.67029 0.20335 0.0000
O31 O 1.0000 0.72544 0.30482 0.18828 0.0000
O32 O 1.0000 0.59065 0.67183 0.20149 0.0000
O33 O 1.0000 0.24299 0.38165 0.46292 0.0000
O34 O 1.0000 0.34114 0.90188 0.46662 0.0000
O35 O 1.0000 0.75181 0.38653 0.46136 0.0000
O36 O 1.0000 0.84480 0.89893 0.46623 0.0000
O37 O 1.0000 0.48427 0.10995 0.13610 0.0000
O38 O 1.0000 0.38392 0.60920 0.13189 0.0000

O39	O	1.0000	0.97943	0.11314	0.13640	0.0000
O40	O	1.0000	0.88592	0.60825	0.13260	0.0000
O41	O	1.0000	0.21364	0.10269	0.46731	0.0000
O42	O	1.0000	0.12532	0.60691	0.46328	0.0000
O43	O	1.0000	0.71922	0.10586	0.46547	0.0000
O44	O	1.0000	0.62176	0.60667	0.46209	0.0000
O45	O	1.0000	0.05838	0.40773	0.13166	0.0000
O46	O	1.0000	0.13522	0.88786	0.13755	0.0000
O47	O	1.0000	0.55961	0.40377	0.13298	0.0000
O48	O	1.0000	0.63201	0.88844	0.13659	0.0000
O49	O	1.0000	0.22834	0.24968	0.54822	0.0000
O50	O	1.0000	0.22867	0.74564	0.54795	0.0000
O51	O	1.0000	0.73102	0.25100	0.54640	0.0000
O52	O	1.0000	0.72651	0.74337	0.54715	0.0000
O53	O	1.0000	0.51632	0.24878	0.05151	0.0000
O54	O	1.0000	0.52009	0.75310	0.05114	0.0000
O55	O	1.0000	0.01354	0.24804	0.05107	0.0000
O56	O	1.0000	0.01883	0.75663	0.05206	0.0000
O57	O	1.0000	0.41928	0.55687	0.53407	0.0000
O58	O	1.0000	0.53871	0.94030	0.53800	0.0000
O59	O	1.0000	0.92033	0.55936	0.53407	0.0000
O60	O	1.0000	0.03707	0.93792	0.53981	0.0000
O61	O	1.0000	0.13717	0.06400	0.06599	0.0000
O62	O	1.0000	0.90079	0.44540	0.05953	0.0000
O63	O	1.0000	0.63607	0.06080	0.06389	0.0000
O64	O	1.0000	0.39964	0.44162	0.06085	0.0000
O65	O	1.0000	0.34554	0.05576	0.54409	0.0000
O66	O	1.0000	0.10847	0.43689	0.53762	0.0000
O67	O	1.0000	0.84563	0.05467	0.54277	0.0000
O68	O	1.0000	0.60852	0.43520	0.53537	0.0000
O69	O	1.0000	0.20892	0.55836	0.05397	0.0000
O70	O	1.0000	0.32526	0.94051	0.06273	0.0000
O71	O	1.0000	0.70789	0.55983	0.05570	0.0000
O72	O	1.0000	0.82599	0.93947	0.06293	0.0000
Si1	Si	1.0000	0.21453	0.99891	0.29447	0.0000
Si2	Si	1.0000	0.27748	0.49355	0.30381	0.0000
Si3	Si	1.0000	0.71257	0.98174	0.29469	0.0000
Si4	Si	1.0000	0.77437	0.48657	0.30336	0.0000
Si5	Si	1.0000	0.98277	0.23385	0.36304	0.0000
Si6	Si	1.0000	0.96615	0.76739	0.36506	0.0000
Si7	Si	1.0000	0.48429	0.24215	0.36445	0.0000
Si8	Si	1.0000	0.46540	0.76714	0.36614	0.0000
Si9	Si	1.0000	0.30029	0.27001	0.23167	0.0000
Si10	Si	1.0000	0.24815	0.73909	0.23566	0.0000
Si11	Si	1.0000	0.79875	0.25783	0.23305	0.0000
Si12	Si	1.0000	0.74661	0.72780	0.23453	0.0000
Si13	Si	1.0000	0.22778	0.23671	0.43021	0.0000
Si14	Si	1.0000	0.21302	0.76713	0.43103	0.0000
Si15	Si	1.0000	0.73331	0.24035	0.42849	0.0000
Si16	Si	1.0000	0.71474	0.76744	0.43026	0.0000
Si17	Si	1.0000	0.05615	0.27583	0.16758	0.0000
Si18	Si	1.0000	0.00382	0.74270	0.16996	0.0000
Si19	Si	1.0000	0.55478	0.26955	0.16853	0.0000
Si20	Si	1.0000	0.50266	0.74286	0.16924	0.0000
Si21	Si	1.0000	0.24853	0.40494	0.52084	0.0000
Si22	Si	1.0000	0.36475	0.90934	0.52458	0.0000
Si23	Si	1.0000	0.75162	0.40690	0.51936	0.0000
Si24	Si	1.0000	0.86451	0.90695	0.52435	0.0000
Si25	Si	1.0000	0.49320	0.09149	0.07827	0.0000
Si26	Si	1.0000	0.37847	0.59224	0.07396	0.0000

Si27	Si	1.0000	0.99177	0.09261	0.07880	0.0000
Si28	Si	1.0000	0.87872	0.59418	0.07454	0.0000
Si29	Si	1.0000	0.20764	0.08823	0.52536	0.0000
Si30	Si	1.0000	0.09445	0.58869	0.52102	0.0000
Si31	Si	1.0000	0.70989	0.08947	0.52351	0.0000
Si32	Si	1.0000	0.59272	0.58694	0.51986	0.0000
Si33	Si	1.0000	0.04257	0.41329	0.07360	0.0000
Si34	Si	1.0000	0.15427	0.91126	0.07957	0.0000
Si35	Si	1.0000	0.54294	0.41190	0.07500	0.0000
Si36	Si	1.0000	0.65359	0.90912	0.07861	0.0000

d-CO2 (optB86b-vdW)

_cell_length_a 9.80
_cell_length_b 9.80
_cell_length_c 34
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120
_symmetry_space_group_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number '1'
_symmetry_cell_setting 'triclinic'
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z

loop_

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
Si1 Si 1.0000 0.07711 0.42140 0.06277 0.0000
Si2 Si 1.0000 0.07731 0.92148 0.06278 0.0000
Si3 Si 1.0000 0.57714 0.42147 0.06266 0.0000
Si4 Si 1.0000 0.57723 0.92140 0.06272 0.0000
Si5 Si 1.0000 0.40911 0.59315 0.06301 0.0000
Si6 Si 1.0000 0.40929 0.09321 0.06306 0.0000
Si7 Si 1.0000 0.90921 0.09314 0.06313 0.0000
Si8 Si 1.0000 0.90914 0.59323 0.06313 0.0000
Si9 Si 1.0000 0.01361 0.25296 0.13920 0.0000
Si10 Si 1.0000 0.01351 0.75298 0.13921 0.0000
Si11 Si 1.0000 0.51353 0.75281 0.13911 0.0000
Si12 Si 1.0000 0.51373 0.25327 0.13910 0.0000
Si13 Si 1.0000 0.26904 0.26742 0.19300 0.0000
Si14 Si 1.0000 0.26889 0.76722 0.19301 0.0000
Si15 Si 1.0000 0.76871 0.26724 0.19297 0.0000
Si16 Si 1.0000 0.76848 0.76704 0.19300 0.0000
Si17 Si 1.0000 0.23124 0.50052 0.24639 0.0000
Si18 Si 1.0000 0.73077 0.50028 0.24637 0.0000
Si19 Si 1.0000 0.73015 0.00018 0.24634 0.0000
Si20 Si 1.0000 0.23127 0.00046 0.24630 0.0000
Si21 Si 1.0000 0.50163 0.23374 0.29974 0.0000
Si22 Si 1.0000 0.00158 0.23351 0.29962 0.0000
Si23 Si 1.0000 0.00189 0.73385 0.29961 0.0000
Si24 Si 1.0000 0.50153 0.73392 0.29982 0.0000
Si25 Si 1.0000 0.26026 0.24759 0.35347 0.0000
Si26 Si 1.0000 0.26016 0.74764 0.35364 0.0000
Si27 Si 1.0000 0.76119 0.24818 0.35354 0.0000
Si28 Si 1.0000 0.76170 0.74902 0.35351 0.0000
Si29 Si 1.0000 0.81656 0.90752 0.42976 0.0000
Si30 Si 1.0000 0.81608 0.40736 0.42971 0.0000
Si31 Si 1.0000 0.31618 0.90720 0.42969 0.0000
Si32 Si 1.0000 0.31585 0.40754 0.42942 0.0000
Si33 Si 1.0000 0.15575 0.57927 0.43014 0.0000
Si34 Si 1.0000 0.65616 0.07869 0.42993 0.0000
Si35 Si 1.0000 0.15631 0.07935 0.42998 0.0000
Si36 Si 1.0000 0.65615 0.57930 0.42983 0.0000
O1 O 1.0000 0.43879 0.25802 0.04398 0.0000
O2 O 1.0000 0.43874 0.75812 0.04400 0.0000

O3 O 1.0000 0.93876 0.75816 0.04409 0.0000
O4 O 1.0000 0.93861 0.25801 0.04410 0.0000
O5 O 1.0000 0.74547 0.45014 0.04664 0.0000
O6 O 1.0000 0.24548 0.95002 0.04667 0.0000
O7 O 1.0000 0.24527 0.45001 0.04663 0.0000
O8 O 1.0000 0.74551 0.94997 0.04668 0.0000
O9 O 1.0000 0.05460 0.06796 0.05038 0.0000
O10 O 1.0000 0.55458 0.06789 0.05030 0.0000
O11 O 1.0000 0.05443 0.56789 0.05038 0.0000
O12 O 1.0000 0.55433 0.56781 0.05019 0.0000
O13 O 1.0000 0.07337 0.40648 0.11076 0.0000
O14 O 1.0000 0.07357 0.90653 0.11077 0.0000
O15 O 1.0000 0.57321 0.40671 0.11065 0.0000
O16 O 1.0000 0.57331 0.90643 0.11071 0.0000
O17 O 1.0000 0.90042 0.10143 0.11140 0.0000
O18 O 1.0000 0.40040 0.60140 0.11128 0.0000
O19 O 1.0000 0.40056 0.10167 0.11132 0.0000
O20 O 1.0000 0.90026 0.60152 0.11139 0.0000
O21 O 1.0000 0.65474 0.22594 0.15482 0.0000
O22 O 1.0000 0.15411 0.72516 0.15500 0.0000
O23 O 1.0000 0.15450 0.22552 0.15495 0.0000
O24 O 1.0000 0.65428 0.72514 0.15487 0.0000
O25 O 1.0000 0.43210 0.28063 0.17753 0.0000
O26 O 1.0000 0.93176 0.78055 0.17759 0.0000
O27 O 1.0000 0.43177 0.78011 0.17752 0.0000
O28 O 1.0000 0.93181 0.28023 0.17761 0.0000
O29 O 1.0000 0.29603 0.93094 0.21201 0.0000
O30 O 1.0000 0.29580 0.43087 0.21208 0.0000
O31 O 1.0000 0.79552 0.43061 0.21212 0.0000
O32 O 1.0000 0.79460 0.93022 0.21209 0.0000
O33 O 1.0000 0.19650 0.13212 0.22697 0.0000
O34 O 1.0000 0.19648 0.63220 0.22706 0.0000
O35 O 1.0000 0.69550 0.13174 0.22689 0.0000
O36 O 1.0000 0.69590 0.63174 0.22696 0.0000
O37 O 1.0000 0.06470 0.36864 0.26562 0.0000
O38 O 1.0000 0.56429 0.36859 0.26567 0.0000
O39 O 1.0000 0.56373 0.86888 0.26576 0.0000
O40 O 1.0000 0.06471 0.86839 0.26547 0.0000
O41 O 1.0000 0.86461 0.57024 0.28075 0.0000
O42 O 1.0000 0.36491 0.07014 0.28074 0.0000
O43 O 1.0000 0.36509 0.57022 0.28078 0.0000
O44 O 1.0000 0.86433 0.07025 0.28063 0.0000
O45 O 1.0000 0.15131 0.72008 0.31517 0.0000
O46 O 1.0000 0.65149 0.22063 0.31525 0.0000
O47 O 1.0000 0.65190 0.72154 0.31523 0.0000
O48 O 1.0000 0.15081 0.21918 0.31508 0.0000
O49 O 1.0000 0.42870 0.77544 0.33791 0.0000
O50 O 1.0000 0.92956 0.27626 0.33765 0.0000
O51 O 1.0000 0.42900 0.27600 0.33774 0.0000
O52 O 1.0000 0.93004 0.77721 0.33756 0.0000
O53 O 1.0000 0.29712 0.39887 0.38118 0.0000
O54 O 1.0000 0.79996 0.90010 0.38148 0.0000
O55 O 1.0000 0.79919 0.39927 0.38147 0.0000
O56 O 1.0000 0.29800 0.89908 0.38144 0.0000
O57 O 1.0000 0.16632 0.59428 0.38213 0.0000
O58 O 1.0000 0.66813 0.09464 0.38198 0.0000
O59 O 1.0000 0.16752 0.09418 0.38201 0.0000
O60 O 1.0000 0.66887 0.59521 0.38186 0.0000
O61 O 1.0000 0.48661 0.43221 0.44152 0.0000
O62 O 1.0000 0.98656 0.43265 0.44258 0.0000

O63	O	1.0000	0.48687	0.93180	0.44190	0.0000
O64	O	1.0000	0.98728	0.93285	0.44250	0.0000
O65	O	1.0000	0.29619	0.05094	0.44619	0.0000
O66	O	1.0000	0.29552	0.55057	0.44604	0.0000
O67	O	1.0000	0.79504	0.55005	0.44621	0.0000
O68	O	1.0000	0.79586	0.05064	0.44621	0.0000
O69	O	1.0000	0.18127	0.24264	0.44871	0.0000
O70	O	1.0000	0.18076	0.74267	0.44885	0.0000
O71	O	1.0000	0.68092	0.74244	0.44863	0.0000
O72	O	1.0000	0.68049	0.24206	0.44874	0.0000
O73	O	1.0000	0.48092	0.06993	0.52620	0.0000
O74	O	1.0000	0.50548	0.32121	0.52507	0.0000
C1	C	1.0000	0.49327	0.19564	0.52545	0.0000

d-CO2-f (optB86b-vdW)

_cell_length_a 9.80
_cell_length_b 9.80
_cell_length_c 34
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120
_symmetry_space_group_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number '1'
_symmetry_cell_setting 'triclinic'
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z

loop_

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
O1 O 1.0000 0.65863 0.77857 0.96632 0.0000
O2 O 1.0000 0.79964 0.64286 0.96252 0.0000
O3 O 1.0000 0.39045 0.89395 0.96598 0.0000
O4 O 1.0000 0.19958 0.62473 0.96842 0.0000
O5 O 1.0000 0.79955 0.19168 0.96234 0.0000
O6 O 1.0000 0.60196 0.26085 0.96501 0.0000
O7 O 1.0000 0.38888 0.41667 0.96693 0.0000
O8 O 1.0000 0.20489 0.14534 0.96877 0.0000
O9 O 1.0000 0.49663 0.10478 0.52903 0.0000
O10 O 1.0000 0.41487 0.29309 0.52699 0.0000
O11 O 1.0000 0.91331 0.29258 0.52702 0.0000
O12 O 1.0000 0.99660 0.10546 0.52914 0.0000
O13 O 1.0000 0.35597 0.69647 0.52977 0.0000
O14 O 1.0000 0.62886 0.87464 0.52948 0.0000
O15 O 1.0000 0.12886 0.87567 0.52961 0.0000
O16 O 1.0000 0.85632 0.69598 0.52979 0.0000
O17 O 1.0000 0.06731 0.36745 0.26736 0.0000
O18 O 1.0000 0.06609 0.86747 0.26653 0.0000
O19 O 1.0000 0.56581 0.36780 0.26741 0.0000
O20 O 1.0000 0.56527 0.86744 0.26648 0.0000
O21 O 1.0000 0.19845 0.13040 0.22798 0.0000
O22 O 1.0000 0.19887 0.63044 0.22860 0.0000
O23 O 1.0000 0.69706 0.13058 0.22787 0.0000
O24 O 1.0000 0.69632 0.63042 0.22830 0.0000
O25 O 1.0000 0.36721 0.06802 0.28148 0.0000
O26 O 1.0000 0.36777 0.56904 0.28229 0.0000
O27 O 1.0000 0.86610 0.06854 0.28150 0.0000
O28 O 1.0000 0.86614 0.56988 0.28215 0.0000
O29 O 1.0000 0.29831 0.42926 0.21365 0.0000
O30 O 1.0000 0.29680 0.92832 0.21292 0.0000
O31 O 1.0000 0.79636 0.42964 0.21366 0.0000
O32 O 1.0000 0.79635 0.92916 0.21298 0.0000
O33 O 1.0000 0.15198 0.21523 0.31630 0.0000
O34 O 1.0000 0.15422 0.72122 0.31625 0.0000
O35 O 1.0000 0.65294 0.21699 0.31621 0.0000
O36 O 1.0000 0.65550 0.72323 0.31629 0.0000
O37 O 1.0000 0.43414 0.27930 0.17858 0.0000
O38 O 1.0000 0.43252 0.77711 0.17850 0.0000

O39	O	1.0000	0.93501	0.28170	0.17922	0.0000
O40	O	1.0000	0.93262	0.77770	0.17909	0.0000
O41	O	1.0000	0.42939	0.27012	0.33925	0.0000
O42	O	1.0000	0.43207	0.77696	0.33881	0.0000
O43	O	1.0000	0.93014	0.27127	0.33916	0.0000
O44	O	1.0000	0.93274	0.77750	0.33887	0.0000
O45	O	1.0000	0.15658	0.22516	0.15626	0.0000
O46	O	1.0000	0.15381	0.72033	0.15649	0.0000
O47	O	1.0000	0.65809	0.22669	0.15587	0.0000
O48	O	1.0000	0.65614	0.72404	0.15590	0.0000
O49	O	1.0000	0.29950	0.39632	0.38208	0.0000
O50	O	1.0000	0.30159	0.89915	0.38277	0.0000
O51	O	1.0000	0.80018	0.39714	0.38209	0.0000
O52	O	1.0000	0.80263	0.89996	0.38291	0.0000
O53	O	1.0000	0.40390	0.10056	0.11230	0.0000
O54	O	1.0000	0.40335	0.59976	0.11205	0.0000
O55	O	1.0000	0.90087	0.10129	0.11329	0.0000
O56	O	1.0000	0.90038	0.59949	0.11279	0.0000
O57	O	1.0000	0.16710	0.09122	0.38362	0.0000
O58	O	1.0000	0.16954	0.59385	0.38270	0.0000
O59	O	1.0000	0.66774	0.09194	0.38343	0.0000
O60	O	1.0000	0.66986	0.59457	0.38264	0.0000
O61	O	1.0000	0.07658	0.40663	0.11226	0.0000
O62	O	1.0000	0.07648	0.90458	0.11257	0.0000
O63	O	1.0000	0.57430	0.40562	0.11160	0.0000
O64	O	1.0000	0.57318	0.90469	0.11170	0.0000
O65	O	1.0000	0.18241	0.24254	0.44977	0.0000
O66	O	1.0000	0.18105	0.74039	0.44953	0.0000
O67	O	1.0000	0.68198	0.24265	0.44961	0.0000
O68	O	1.0000	0.68087	0.74059	0.44954	0.0000
O69	O	1.0000	0.43982	0.25638	0.04509	0.0000
O70	O	1.0000	0.44067	0.75646	0.04484	0.0000
O71	O	1.0000	0.93987	0.25751	0.04598	0.0000
O72	O	1.0000	0.93974	0.75785	0.04588	0.0000
O73	O	1.0000	0.48916	0.43067	0.44257	0.0000
O74	O	1.0000	0.48777	0.93170	0.44411	0.0000
O75	O	1.0000	0.98893	0.43058	0.44273	0.0000
O76	O	1.0000	0.98764	0.93180	0.44446	0.0000
O77	O	1.0000	0.05738	0.06836	0.05288	0.0000
O78	O	1.0000	0.05716	0.56833	0.05214	0.0000
O79	O	1.0000	0.55648	0.06639	0.05096	0.0000
O80	O	1.0000	0.55683	0.56643	0.05082	0.0000
O81	O	1.0000	0.29668	0.04948	0.44763	0.0000
O82	O	1.0000	0.29886	0.55040	0.44646	0.0000
O83	O	1.0000	0.79664	0.04994	0.44763	0.0000
O84	O	1.0000	0.79896	0.55081	0.44644	0.0000
O85	O	1.0000	0.24665	0.44810	0.04783	0.0000
O86	O	1.0000	0.24652	0.94793	0.04808	0.0000
O87	O	1.0000	0.74777	0.44842	0.04785	0.0000
O88	O	1.0000	0.74826	0.94874	0.04842	0.0000
Si1	Si	1.0000	0.23285	0.99849	0.24724	0.0000
Si2	Si	1.0000	0.23367	0.49885	0.24796	0.0000
Si3	Si	1.0000	0.73189	0.99905	0.24723	0.0000
Si4	Si	1.0000	0.73179	0.49951	0.24788	0.0000
Si5	Si	1.0000	0.00319	0.23068	0.30095	0.0000
Si6	Si	1.0000	0.00389	0.73366	0.30084	0.0000
Si7	Si	1.0000	0.50311	0.23082	0.30097	0.0000
Si8	Si	1.0000	0.50421	0.73386	0.30087	0.0000
Si9	Si	1.0000	0.27133	0.26630	0.19422	0.0000
Si10	Si	1.0000	0.26997	0.76421	0.19427	0.0000

Si11	Si	1.0000	0.77085	0.26724	0.19426	0.0000
Si12	Si	1.0000	0.76951	0.76530	0.19420	0.0000
Si13	Si	1.0000	0.26106	0.24356	0.35478	0.0000
Si14	Si	1.0000	0.26341	0.74841	0.35463	0.0000
Si15	Si	1.0000	0.76181	0.24465	0.35470	0.0000
Si16	Si	1.0000	0.76427	0.74943	0.35468	0.0000
Si17	Si	1.0000	0.01580	0.25323	0.14077	0.0000
Si18	Si	1.0000	0.01442	0.75005	0.14075	0.0000
Si19	Si	1.0000	0.51611	0.25247	0.14012	0.0000
Si20	Si	1.0000	0.51504	0.75111	0.14006	0.0000
Si21	Si	1.0000	0.31843	0.40629	0.43031	0.0000
Si22	Si	1.0000	0.31713	0.90619	0.43107	0.0000
Si23	Si	1.0000	0.81846	0.40660	0.43033	0.0000
Si24	Si	1.0000	0.81728	0.90656	0.43122	0.0000
Si25	Si	1.0000	0.41112	0.09145	0.06402	0.0000
Si26	Si	1.0000	0.41135	0.59134	0.06380	0.0000
Si27	Si	1.0000	0.91098	0.09285	0.06503	0.0000
Si28	Si	1.0000	0.91074	0.59235	0.06453	0.0000
Si29	Si	1.0000	0.15671	0.07805	0.43165	0.0000
Si30	Si	1.0000	0.15811	0.57790	0.43067	0.0000
Si31	Si	1.0000	0.65679	0.07837	0.43146	0.0000
Si32	Si	1.0000	0.65824	0.57829	0.43061	0.0000
Si33	Si	1.0000	0.07930	0.42117	0.06426	0.0000
Si34	Si	1.0000	0.07922	0.92080	0.06462	0.0000
Si35	Si	1.0000	0.57908	0.41991	0.06361	0.0000
Si36	Si	1.0000	0.57908	0.91994	0.06368	0.0000
C1	C	1.0000	0.45538	0.19865	0.52785	0.0000
C2	C	1.0000	0.95458	0.19873	0.52792	0.0000
C3	C	1.0000	0.49234	0.78576	0.52950	0.0000
C4	C	1.0000	0.99251	0.78603	0.52957	0.0000
C5	C	1.0000	0.72885	0.71043	0.96455	0.0000
C6	C	1.0000	0.29531	0.75924	0.96737	0.0000
C7	C	1.0000	0.70068	0.22607	0.96379	0.0000
C8	C	1.0000	0.29721	0.28086	0.96801	0.0000

rd-CO2 (optB86b-vdW)

_cell_length_a 9.80
_cell_length_b 9.80
_cell_length_c 34
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120
_symmetry_space_group_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number '1'
_symmetry_cell_setting 'triclinic'
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z

loop_

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
O1 O 1.0000 0.48224 0.29667 0.52865 0.0000
O2 O 1.0000 0.50952 0.07159 0.53092 0.0000
O3 O 1.0000 0.11611 0.37432 0.27370 0.0000
O4 O 1.0000 0.05533 0.90758 0.26993 0.0000
O5 O 1.0000 0.61693 0.39055 0.27685 0.0000
O6 O 1.0000 0.54886 0.89976 0.26853 0.0000
O7 O 1.0000 0.17744 0.10021 0.21169 0.0000
O8 O 1.0000 0.23531 0.59973 0.22279 0.0000
O9 O 1.0000 0.68399 0.08059 0.20853 0.0000
O10 O 1.0000 0.73448 0.57979 0.21717 0.0000
O11 O 1.0000 0.36422 0.10679 0.27124 0.0000
O12 O 1.0000 0.41568 0.59707 0.28291 0.0000
O13 O 1.0000 0.85800 0.09446 0.27217 0.0000
O14 O 1.0000 0.92041 0.60360 0.27951 0.0000
O15 O 1.0000 0.34823 0.40317 0.22518 0.0000
O16 O 1.0000 0.25939 0.88076 0.22087 0.0000
O17 O 1.0000 0.83218 0.37667 0.22944 0.0000
O18 O 1.0000 0.75533 0.85756 0.22493 0.0000
O19 O 1.0000 0.06988 0.16747 0.32863 0.0000
O20 O 1.0000 0.07677 0.80207 0.34036 0.0000
O21 O 1.0000 0.57302 0.17085 0.32800 0.0000
O22 O 1.0000 0.58233 0.80962 0.34004 0.0000
O23 O 1.0000 0.45262 0.25644 0.17792 0.0000
O24 O 1.0000 0.40364 0.80007 0.16700 0.0000
O25 O 1.0000 0.96111 0.26710 0.17825 0.0000
O26 O 1.0000 0.90527 0.80251 0.16664 0.0000
O27 O 1.0000 0.38453 0.29792 0.32834 0.0000
O28 O 1.0000 0.30241 0.75753 0.31728 0.0000
O29 O 1.0000 0.88742 0.30026 0.32616 0.0000
O30 O 1.0000 0.80159 0.75478 0.31669 0.0000
O31 O 1.0000 0.22865 0.31071 0.15332 0.0000
O32 O 1.0000 0.08791 0.66968 0.16795 0.0000
O33 O 1.0000 0.72571 0.30572 0.15539 0.0000
O34 O 1.0000 0.58974 0.67175 0.16667 0.0000
O35 O 1.0000 0.24449 0.38293 0.38261 0.0000
O36 O 1.0000 0.34072 0.90233 0.38568 0.0000
O37 O 1.0000 0.75203 0.38760 0.38127 0.0000
O38 O 1.0000 0.84417 0.90000 0.38547 0.0000

O39	O	1.0000	0.48424	0.10983	0.11244	0.0000
O40	O	1.0000	0.38365	0.60898	0.10901	0.0000
O41	O	1.0000	0.98067	0.11221	0.11267	0.0000
O42	O	1.0000	0.88567	0.60712	0.10940	0.0000
O43	O	1.0000	0.21430	0.10353	0.38601	0.0000
O44	O	1.0000	0.12534	0.60729	0.38293	0.0000
O45	O	1.0000	0.72070	0.10766	0.38483	0.0000
O46	O	1.0000	0.62144	0.60777	0.38213	0.0000
O47	O	1.0000	0.05802	0.40639	0.10881	0.0000
O48	O	1.0000	0.13473	0.88671	0.11350	0.0000
O49	O	1.0000	0.55912	0.40357	0.10976	0.0000
O50	O	1.0000	0.63203	0.88820	0.11290	0.0000
O51	O	1.0000	0.22825	0.24986	0.45295	0.0000
O52	O	1.0000	0.22866	0.74610	0.45291	0.0000
O53	O	1.0000	0.72966	0.25143	0.45169	0.0000
O54	O	1.0000	0.72687	0.74421	0.45239	0.0000
O55	O	1.0000	0.51557	0.24797	0.04251	0.0000
O56	O	1.0000	0.51985	0.75293	0.04231	0.0000
O57	O	1.0000	0.01399	0.24716	0.04219	0.0000
O58	O	1.0000	0.01902	0.75507	0.04285	0.0000
O59	O	1.0000	0.41927	0.55760	0.44165	0.0000
O60	O	1.0000	0.53891	0.94048	0.44429	0.0000
O61	O	1.0000	0.92048	0.55967	0.44148	0.0000
O62	O	1.0000	0.03722	0.93850	0.44595	0.0000
O63	O	1.0000	0.13693	0.06243	0.05425	0.0000
O64	O	1.0000	0.90032	0.44375	0.04916	0.0000
O65	O	1.0000	0.63631	0.06070	0.05284	0.0000
O66	O	1.0000	0.39964	0.44157	0.05020	0.0000
O67	O	1.0000	0.34553	0.05629	0.44964	0.0000
O68	O	1.0000	0.10843	0.43707	0.44425	0.0000
O69	O	1.0000	0.84588	0.05574	0.44879	0.0000
O70	O	1.0000	0.60860	0.43593	0.44237	0.0000
O71	O	1.0000	0.20854	0.55770	0.04467	0.0000
O72	O	1.0000	0.32548	0.93953	0.05185	0.0000
O73	O	1.0000	0.70789	0.55879	0.04583	0.0000
O74	O	1.0000	0.82584	0.93877	0.05205	0.0000
Si1	Si	1.0000	0.21408	0.99761	0.24352	0.0000
Si2	Si	1.0000	0.27751	0.49289	0.25106	0.0000
Si3	Si	1.0000	0.71224	0.98332	0.24355	0.0000
Si4	Si	1.0000	0.77487	0.48772	0.25073	0.0000
Si5	Si	1.0000	0.98257	0.23476	0.30010	0.0000
Si6	Si	1.0000	0.96565	0.76786	0.30195	0.0000
Si7	Si	1.0000	0.48412	0.24150	0.30114	0.0000
Si8	Si	1.0000	0.46489	0.76718	0.30261	0.0000
Si9	Si	1.0000	0.30028	0.26906	0.19162	0.0000
Si10	Si	1.0000	0.24771	0.73814	0.19465	0.0000
Si11	Si	1.0000	0.79888	0.25925	0.19250	0.0000
Si12	Si	1.0000	0.74650	0.72904	0.19377	0.0000
Si13	Si	1.0000	0.22842	0.23794	0.35546	0.0000
Si14	Si	1.0000	0.21277	0.76749	0.35627	0.0000
Si15	Si	1.0000	0.73351	0.24126	0.35418	0.0000
Si16	Si	1.0000	0.71422	0.76829	0.35578	0.0000
Si17	Si	1.0000	0.05588	0.27461	0.13853	0.0000
Si18	Si	1.0000	0.00325	0.74167	0.14028	0.0000
Si19	Si	1.0000	0.55469	0.26963	0.13915	0.0000
Si20	Si	1.0000	0.50221	0.74286	0.13986	0.0000
Si21	Si	1.0000	0.24898	0.40561	0.43051	0.0000
Si22	Si	1.0000	0.36485	0.90952	0.43355	0.0000
Si23	Si	1.0000	0.75167	0.40783	0.42916	0.0000
Si24	Si	1.0000	0.86441	0.90783	0.43349	0.0000

Si25	Si	1.0000	0.49311	0.09102	0.06467	0.0000
Si26	Si	1.0000	0.37828	0.59200	0.06115	0.0000
Si27	Si	1.0000	0.99208	0.09160	0.06506	0.0000
Si28	Si	1.0000	0.87858	0.59285	0.06144	0.0000
Si29	Si	1.0000	0.20762	0.08877	0.43394	0.0000
Si30	Si	1.0000	0.09462	0.58907	0.43064	0.0000
Si31	Si	1.0000	0.71009	0.09026	0.43276	0.0000
Si32	Si	1.0000	0.59272	0.58790	0.42990	0.0000
Si33	Si	1.0000	0.04240	0.41213	0.06084	0.0000
Si34	Si	1.0000	0.15416	0.90987	0.06560	0.0000
Si35	Si	1.0000	0.54268	0.41140	0.06184	0.0000
Si36	Si	1.0000	0.65360	0.90886	0.06499	0.0000
C1	C	1.0000	0.49588	0.18417	0.52963	0.0000

rd-CO2-f (optB86b-vdW)

_cell_length_a 9.80
_cell_length_b 9.80
_cell_length_c 34
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120
_symmetry_space_group_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number '1'
_symmetry_cell_setting 'triclinic'
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z

loop_

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
O1 O 1.0000 0.70963 0.89771 0.96326 0.0000
O2 O 1.0000 0.77488 0.69707 0.96227 0.0000
O3 O 1.0000 0.22096 0.80892 0.96440 0.0000
O4 O 1.0000 0.31248 0.62907 0.95838 0.0000
O5 O 1.0000 0.64227 0.19163 0.96370 0.0000
O6 O 1.0000 0.91189 0.38167 0.96180 0.0000
O7 O 1.0000 0.10853 0.13284 0.96361 0.0000
O8 O 1.0000 0.37681 0.32729 0.96414 0.0000
O9 O 1.0000 0.52174 0.08356 0.53047 0.0000
O10 O 1.0000 0.46310 0.28871 0.52812 0.0000
O11 O 1.0000 0.93881 0.34295 0.52964 0.0000
O12 O 1.0000 0.02203 0.15580 0.53252 0.0000
O13 O 1.0000 0.32974 0.60702 0.52940 0.0000
O14 O 1.0000 0.59862 0.79971 0.53050 0.0000
O15 O 1.0000 0.12639 0.85734 0.53175 0.0000
O16 O 1.0000 0.86318 0.65131 0.52856 0.0000
O17 O 1.0000 0.11505 0.37363 0.27345 0.0000
O18 O 1.0000 0.05530 0.90848 0.27055 0.0000
O19 O 1.0000 0.61714 0.39015 0.27653 0.0000
O20 O 1.0000 0.54783 0.89919 0.26887 0.0000
O21 O 1.0000 0.17674 0.09867 0.21192 0.0000
O22 O 1.0000 0.23492 0.59800 0.22223 0.0000
O23 O 1.0000 0.68312 0.08122 0.20925 0.0000
O24 O 1.0000 0.73438 0.58053 0.21712 0.0000
O25 O 1.0000 0.36432 0.10655 0.27143 0.0000
O26 O 1.0000 0.41448 0.59630 0.28280 0.0000
O27 O 1.0000 0.85677 0.09397 0.27292 0.0000
O28 O 1.0000 0.92025 0.60401 0.27946 0.0000
O29 O 1.0000 0.34780 0.40183 0.22522 0.0000
O30 O 1.0000 0.25773 0.87850 0.22173 0.0000
O31 O 1.0000 0.83384 0.37853 0.22910 0.0000
O32 O 1.0000 0.75518 0.85829 0.22532 0.0000
O33 O 1.0000 0.07104 0.16931 0.32892 0.0000
O34 O 1.0000 0.07468 0.80004 0.34077 0.0000
O35 O 1.0000 0.57390 0.17189 0.32802 0.0000
O36 O 1.0000 0.58009 0.80755 0.34028 0.0000
O37 O 1.0000 0.45194 0.25400 0.17829 0.0000
O38 O 1.0000 0.40529 0.80319 0.16755 0.0000

O39	O	1.0000	0.95965	0.26365	0.17841	0.0000
O40	O	1.0000	0.90667	0.80500	0.16718	0.0000
O41	O	1.0000	0.38554	0.29883	0.32828	0.0000
O42	O	1.0000	0.30054	0.75607	0.31727	0.0000
O43	O	1.0000	0.88845	0.30178	0.32649	0.0000
O44	O	1.0000	0.80043	0.75445	0.31664	0.0000
O45	O	1.0000	0.22775	0.30819	0.15341	0.0000
O46	O	1.0000	0.08918	0.67167	0.16774	0.0000
O47	O	1.0000	0.72502	0.30383	0.15537	0.0000
O48	O	1.0000	0.59082	0.67406	0.16671	0.0000
O49	O	1.0000	0.24772	0.38493	0.38272	0.0000
O50	O	1.0000	0.33981	0.90133	0.38560	0.0000
O51	O	1.0000	0.75232	0.38785	0.38161	0.0000
O52	O	1.0000	0.84374	0.90071	0.38527	0.0000
O53	O	1.0000	0.48306	0.10823	0.11251	0.0000
O54	O	1.0000	0.38189	0.61083	0.10970	0.0000
O55	O	1.0000	0.98005	0.11074	0.11245	0.0000
O56	O	1.0000	0.88363	0.60827	0.11005	0.0000
O57	O	1.0000	0.21536	0.10455	0.38611	0.0000
O58	O	1.0000	0.12521	0.60583	0.38305	0.0000
O59	O	1.0000	0.71978	0.10712	0.38473	0.0000
O60	O	1.0000	0.62221	0.60726	0.38214	0.0000
O61	O	1.0000	0.05674	0.40477	0.10933	0.0000
O62	O	1.0000	0.13348	0.88798	0.11334	0.0000
O63	O	1.0000	0.55698	0.40200	0.11036	0.0000
O64	O	1.0000	0.63166	0.88939	0.11283	0.0000
O65	O	1.0000	0.23051	0.25096	0.45302	0.0000
O66	O	1.0000	0.22884	0.74529	0.45290	0.0000
O67	O	1.0000	0.72832	0.25001	0.45170	0.0000
O68	O	1.0000	0.72846	0.74499	0.45211	0.0000
O69	O	1.0000	0.51198	0.24732	0.04299	0.0000
O70	O	1.0000	0.51744	0.75179	0.04263	0.0000
O71	O	1.0000	0.01209	0.24749	0.04234	0.0000
O72	O	1.0000	0.01594	0.75351	0.04317	0.0000
O73	O	1.0000	0.42129	0.55911	0.44195	0.0000
O74	O	1.0000	0.53831	0.93878	0.44420	0.0000
O75	O	1.0000	0.92125	0.55883	0.44179	0.0000
O76	O	1.0000	0.03764	0.93927	0.44581	0.0000
O77	O	1.0000	0.13540	0.06186	0.05368	0.0000
O78	O	1.0000	0.89622	0.44209	0.05035	0.0000
O79	O	1.0000	0.63468	0.06062	0.05262	0.0000
O80	O	1.0000	0.39534	0.44026	0.05145	0.0000
O81	O	1.0000	0.34617	0.05594	0.44956	0.0000
O82	O	1.0000	0.10956	0.43621	0.44436	0.0000
O83	O	1.0000	0.84600	0.05648	0.44867	0.0000
O84	O	1.0000	0.60924	0.43623	0.44271	0.0000
O85	O	1.0000	0.20563	0.55852	0.04550	0.0000
O86	O	1.0000	0.32366	0.93828	0.05186	0.0000
O87	O	1.0000	0.70439	0.55823	0.04665	0.0000
O88	O	1.0000	0.82409	0.93824	0.05179	0.0000
Si1	Si	1.0000	0.21358	0.99693	0.24395	0.0000
Si2	Si	1.0000	0.27677	0.49189	0.25087	0.0000
Si3	Si	1.0000	0.71157	0.98347	0.24409	0.0000
Si4	Si	1.0000	0.77523	0.48828	0.25053	0.0000
Si5	Si	1.0000	0.98271	0.23534	0.30038	0.0000
Si6	Si	1.0000	0.96477	0.76749	0.30218	0.0000
Si7	Si	1.0000	0.48471	0.24191	0.30109	0.0000
Si8	Si	1.0000	0.46330	0.76590	0.30274	0.0000
Si9	Si	1.0000	0.29970	0.26725	0.19178	0.0000
Si10	Si	1.0000	0.24783	0.73842	0.19479	0.0000

Si11	Si	1.0000	0.79866	0.25866	0.19261	0.0000
Si12	Si	1.0000	0.74700	0.73059	0.19399	0.0000
Si13	Si	1.0000	0.22998	0.23920	0.35558	0.0000
Si14	Si	1.0000	0.21144	0.76600	0.35636	0.0000
Si15	Si	1.0000	0.73394	0.24209	0.35433	0.0000
Si16	Si	1.0000	0.71347	0.76794	0.35579	0.0000
Si17	Si	1.0000	0.05492	0.27219	0.13869	0.0000
Si18	Si	1.0000	0.00329	0.74356	0.14049	0.0000
Si19	Si	1.0000	0.55361	0.26764	0.13938	0.0000
Si20	Si	1.0000	0.50256	0.74512	0.14018	0.0000
Si21	Si	1.0000	0.25131	0.40661	0.43061	0.0000
Si22	Si	1.0000	0.36443	0.90881	0.43344	0.0000
Si23	Si	1.0000	0.75193	0.40748	0.42956	0.0000
Si24	Si	1.0000	0.86502	0.90891	0.43326	0.0000
Si25	Si	1.0000	0.49107	0.09022	0.06467	0.0000
Si26	Si	1.0000	0.37548	0.59190	0.06190	0.0000
Si27	Si	1.0000	0.99069	0.09111	0.06476	0.0000
Si28	Si	1.0000	0.87532	0.59239	0.06212	0.0000
Si29	Si	1.0000	0.20875	0.08942	0.43408	0.0000
Si30	Si	1.0000	0.09494	0.58775	0.43076	0.0000
Si31	Si	1.0000	0.70907	0.08945	0.43263	0.0000
Si32	Si	1.0000	0.59433	0.58828	0.42990	0.0000
Si33	Si	1.0000	0.03964	0.41159	0.06147	0.0000
Si34	Si	1.0000	0.15221	0.90911	0.06536	0.0000
Si35	Si	1.0000	0.53922	0.41039	0.06251	0.0000
Si36	Si	1.0000	0.65200	0.90894	0.06488	0.0000
C1	C	1.0000	0.49224	0.18610	0.52917	0.0000
C2	C	1.0000	0.98056	0.24944	0.53097	0.0000
C3	C	1.0000	0.46428	0.70358	0.52988	0.0000
C4	C	1.0000	0.99470	0.75433	0.53008	0.0000
C5	C	1.0000	0.74232	0.79732	0.96286	0.0000
C6	C	1.0000	0.26655	0.71889	0.96151	0.0000
C7	C	1.0000	0.77695	0.28646	0.96284	0.0000
C8	C	1.0000	0.24278	0.23018	0.96396	0.0000