

DFT-optimized structures in "xyz" chemical file format.

Line one and two indicate the number of atoms the label name of structures, respectively,  
with xyz coordnates followed below.

145

structure H-Y model

Si	18.85450	12.64948	13.89203
Si	21.30220	4.10120	4.79948
Si	15.72552	17.26809	7.30898
Si	10.18757	9.43641	4.80005
Si	18.80781	7.29370	13.83633
Si	15.75840	15.50495	2.27085
Si	24.39402	7.65284	7.28997
Si	22.83767	8.54141	2.26482
Si	11.73153	4.95278	7.32276
Si	20.37670	16.39959	4.80881
Si	14.22856	9.98288	13.84998
Si	18.83313	2.67248	3.75742
Si	18.83009	15.49694	12.84355
Si	15.72874	17.27047	10.34669
Si	15.79898	4.39771	1.23065
Si	11.75751	8.56388	12.79627
Si	22.84296	14.94912	3.77664
Si	22.82897	11.41494	1.26266
Si	11.69886	4.97952	10.38853
Si	13.26377	14.09235	1.27742
Si	24.39208	7.66608	10.33282
Si	21.30650	5.86973	12.83552
Si	10.16981	12.31886	3.79193
Si	24.36114	12.30072	3.79359
Si	13.26807	5.87946	12.83739
Si	10.20431	7.65297	10.33900
Si	21.29659	14.05999	1.24510
Si	15.73310	15.50267	12.84338
Si	15.73670	2.65269	3.80468
Si	18.87897	4.41937	1.24103
Si	18.82599	17.25289	10.34552
Si	11.68775	11.47042	1.26294
Si	22.84639	4.99676	10.34223
Si	22.79957	8.56047	12.80184
Si	11.72403	14.95318	3.80405
Si	15.76133	7.29114	13.84999
Si	24.38218	9.43038	4.80147
Si	10.20525	7.62890	7.27346

Si	18.82473	15.51430	2.25157
Si	14.20112	16.38595	4.80745
Si	20.36683	9.94458	13.85313
Si	11.74655	8.59254	2.26453
Si	22.83767	4.97543	7.29485
Si	21.31851	5.88609	2.26467
Si	18.83449	17.25804	7.30638
Si	13.30743	4.07214	4.89726
Si	15.74776	12.64292	13.86418
Al	13.16420	5.89138	2.34343
O	19.15359	13.90323	12.88969
O	19.75400	3.59070	4.73604
O	15.40746	16.77999	8.82826
O	14.96116	5.78031	1.75762
O	10.47176	11.04295	4.75874
O	19.76848	6.39113	12.87907
O	14.80141	14.28108	1.78008
O	24.08833	8.15247	8.81001
O	22.25202	9.97624	1.76602
O	12.24039	5.01966	8.86336
O	21.63445	15.36198	4.78126
O	13.00534	9.60347	12.84381
O	24.07475	11.02846	4.76697
O	14.79395	6.43667	12.85912
O	10.51604	8.08753	8.80493
O	19.75575	14.28796	1.71722
O	15.42450	13.90494	12.88782
O	14.82393	3.44361	4.87791
O	19.77093	5.66387	1.78558
O	19.14453	16.76383	8.82706
O	12.26974	10.06528	1.80772
O	22.26740	4.99509	8.81949
O	21.55299	9.59525	12.76731
O	12.96886	15.32243	4.78449
O	10.49490	8.12428	1.31170
O	5.02403	2.89521	4.36879
O	6.76231	3.89126	7.15778
O	12.33144	4.88642	1.22602
O	8.63917	9.14385	4.36574
O	10.35311	1.84430	1.28024
O	6.91731	1.81751	1.28171
O	8.65085	7.13780	7.16110
O	6.76816	8.05453	1.29633
O	10.50678	3.88199	7.16974

O	12.24852	2.91777	4.40440
O	5.03328	5.06792	1.27241
O	19.05407	3.11327	2.19596
O	17.28071	15.78165	13.27265
O	17.27962	17.76503	10.46079
O	15.45121	3.22850	2.28197
O	12.23875	7.07613	13.25045
O	22.31013	14.86609	2.23777
O	24.03952	11.90394	2.24253
O	10.48693	6.06086	10.56973
O	12.24063	14.90395	2.25686
O	24.06618	6.07424	10.48189
O	22.32777	7.07120	13.26760
O	10.46510	11.97319	2.22396
O	17.29878	12.19296	13.77556
O	21.52963	5.33950	3.77538
O	17.27725	17.02100	6.92345
O	13.19835	5.34668	3.95246
O	11.16422	8.65061	3.78403
O	19.15016	8.86780	13.69713
O	15.37717	15.95615	3.78019
O	23.41576	6.42900	6.87193
O	23.40264	8.63736	3.78003
O	11.18062	6.40554	6.84285
O	19.22833	15.93376	3.76287
O	15.40419	8.87154	13.77942
O	27.84176	16.07515	3.89424
O	19.78318	16.33240	13.85646
O	32.05371	18.50791	10.76451
O	23.95257	9.04046	13.86166
O	27.87813	9.02513	13.82957
O	24.05116	16.03782	3.80519
O	32.05411	16.30514	13.86903
O	19.79054	18.48024	10.78399
O	21.71592	19.62930	13.88033
O	25.94146	7.92250	10.73139
O	30.17519	19.59716	13.85078
O	25.90545	12.77742	3.89828
O	19.80243	11.41603	13.45095
O	21.60110	4.58884	6.31575
O	14.78894	16.39579	6.31557
O	12.98197	7.58439	2.16339
O	10.46905	8.90620	6.31000
O	17.28027	7.04073	13.34789

O	17.29146	14.98465	2.25008
O	24.10257	8.90834	6.30961
O	21.61053	7.47780	2.21817
O	13.00474	4.48845	6.44146
O	19.75718	16.37499	6.30832
O	14.81581	11.41124	13.37232
O	17.28908	2.90335	4.18271
O	19.09956	15.99275	11.32379
O	15.43689	16.01994	11.33555
O	17.32394	4.91302	1.26378
O	11.15832	8.56248	11.29038
O	23.40338	13.51468	4.27926
O	21.59260	12.46538	1.28079
O	12.95661	5.34372	11.34316
O	12.92603	12.51377	1.29599
O	23.46447	8.54547	11.32702
O	21.61633	5.38711	11.32069
O	11.11973	13.53449	4.29528
H	15.43823	6.62909	1.72753

187

structure 1

Si	18.851869	12.652841	13.888546
Si	21.298809	4.109059	4.799845
Si	15.726416	17.266258	7.306940
Si	10.189744	9.439963	4.806669
Si	18.804781	7.289522	13.839118
Si	15.759067	15.495698	2.274566
Si	24.393878	7.663002	7.295047
Si	22.839505	8.536935	2.261046
Si	11.739555	4.956313	7.323533
Si	20.380283	16.398755	4.812012
Si	14.234361	9.979428	13.844638
Si	18.829022	2.676285	3.755466
Si	18.835907	15.489319	12.839233
Si	15.731799	17.266910	10.346611
Si	15.788107	4.436866	1.240710
Si	11.762089	8.561477	12.794199
Si	22.844867	14.950922	3.778882
Si	22.831422	11.411991	1.262306
Si	11.700772	4.980480	10.387341
Si	13.263953	14.088079	1.281475
Si	24.387067	7.678522	10.336031
Si	21.309598	5.872048	12.835879

Si	10.170263	12.319841	3.797690
Si	24.356548	12.301568	3.797790
Si	13.269504	5.879243	12.836649
Si	10.203660	7.652506	10.340885
Si	21.294593	14.054508	1.245993
Si	15.733423	15.497213	12.839971
Si	15.733971	2.664203	3.798465
Si	18.874446	4.422326	1.238176
Si	18.830499	17.245818	10.346389
Si	11.692336	11.466566	1.265765
Si	22.843061	4.998290	10.338269
Si	22.797152	8.567568	12.811402
Si	11.721768	14.953956	3.808490
Si	15.763820	7.285025	13.844031
Si	24.379440	9.429398	4.801437
Si	10.209675	7.632941	7.274677
Si	18.821299	15.501939	2.256531
Si	14.202175	16.387016	4.811072
Si	20.362905	9.944059	13.868047
Si	11.734971	8.597208	2.264399
Si	22.828170	4.981805	7.294431
Si	21.316435	5.887627	2.260332
Si	18.836938	17.259823	7.305412
Si	13.309905	4.077492	4.899576
Si	15.745824	12.638951	13.854180
Al	13.194510	5.902955	2.341281
O	19.160068	13.896404	12.876198
O	19.753334	3.594345	4.732721
O	15.422423	16.772520	8.827154
O	14.974197	5.818743	1.765095
O	10.475012	11.045075	4.762998
O	19.773867	6.400718	12.877386
O	14.798317	14.270024	1.794931
O	24.093516	8.170678	8.812916
O	22.255754	9.972228	1.763379
O	12.249365	5.030753	8.864667
O	21.636700	15.360808	4.785285
O	13.016173	9.593217	12.836139
O	24.066132	11.026391	4.765668
O	14.792778	6.443011	12.847558
O	10.520763	8.085359	8.807494
O	19.753195	14.277866	1.718506
O	15.420583	13.900697	12.879614
O	14.824556	3.444439	4.882885

O	19.765568	5.668014	1.789980
O	19.136614	16.757884	8.825586
O	12.283851	10.064659	1.812987
O	22.259062	4.988414	8.818457
O	21.535918	9.583894	12.771283
O	12.970063	15.323858	4.784188
O	10.481295	8.155862	1.303273
O	5.025138	2.900371	4.383700
O	6.740240	3.884214	7.154385
O	12.339962	4.900396	1.234066
O	8.641038	9.147773	4.375981
O	10.339131	1.826860	1.279418
O	6.922771	1.800048	1.273560
O	8.651937	7.155825	7.156734
O	6.763282	8.044669	1.287208
O	10.517287	3.882800	7.172793
O	12.247925	2.919635	4.417632
O	5.029826	5.072436	1.264260
O	19.048470	3.113452	2.191299
O	17.283826	15.771285	13.263932
O	17.283801	17.752489	10.475188
O	15.455184	3.252882	2.284864
O	12.235169	7.071553	13.250186
O	22.308841	14.853112	2.242143
O	24.037485	11.905193	2.244918
O	10.488454	6.061122	10.572521
O	12.232885	14.889946	2.260024
O	24.054002	6.086435	10.473264
O	22.331338	7.071538	13.266710
O	10.475603	11.971366	2.231611
O	17.297597	12.194143	13.768338
O	21.529785	5.341589	3.770242
O	17.279289	17.033192	6.915179
O	13.196746	5.350259	3.952755
O	11.161178	8.656816	3.785113
O	19.142300	8.867770	13.722672
O	15.376266	15.960317	3.779525
O	23.417687	6.434494	6.888094
O	23.409219	8.629613	3.774914
O	11.177253	6.404659	6.840150
O	19.235768	15.932666	3.760859
O	15.412217	8.869139	13.786042
O	27.843886	16.079897	3.897659
O	19.780912	16.322666	13.862627

O	32.062134	18.511747	10.752552
O	23.940840	9.056634	13.874363
O	27.890304	9.039010	13.827491
O	24.043459	16.049789	3.786234
O	32.060505	16.299854	13.870558
O	19.789972	18.480163	10.776838
O	21.726119	19.637507	13.889397
O	25.940429	7.926358	10.728886
O	30.172791	19.600720	13.855272
O	25.903926	12.770660	3.903343
O	19.797700	11.415130	13.458605
O	21.588311	4.624776	6.308280
O	14.795489	16.382437	6.317482
O	12.963213	7.588600	2.167367
O	10.481356	8.912306	6.315211
O	17.280615	7.028535	13.339271
O	17.289185	14.965884	2.266752
O	24.091061	8.910823	6.308477
O	21.605632	7.480420	2.217478
O	13.015974	4.494126	6.446777
O	19.759744	16.373912	6.311431
O	14.817285	11.406977	13.358475
O	17.287017	2.906690	4.187003
O	19.121932	15.985219	11.321885
O	15.428514	16.020025	11.336303
O	17.325307	4.915471	1.260489
O	11.159710	8.561941	11.290221
O	23.411428	13.521381	4.293703
O	21.594065	12.460189	1.276317
O	12.958554	5.337054	11.345400
O	12.933811	12.507229	1.283388
O	23.460371	8.555585	11.333554
O	21.613600	5.377594	11.322282
O	11.116459	13.537175	4.304770
H	15.477686	6.689221	1.775276
H	15.102855	9.294257	1.351323
H	17.672446	7.781935	2.236521
H	17.055075	7.979790	0.497335
H	15.737963	9.090087	3.077970
C	15.864846	8.880704	2.013127
C	16.904124	8.164692	1.562649
O	19.124545	13.146045	15.417642
O	22.311639	2.900371	4.383700
O	15.383490	18.854763	7.154385

O	18.982381	6.817043	15.393787
O	15.566022	16.770597	1.273560
O	25.938438	7.155825	7.156734
O	24.049783	8.044669	1.287208
O	20.891176	17.890184	4.417632
O	13.673076	10.062619	15.378629
O	19.200635	1.109348	3.897659
O	14.775633	18.511747	10.752552
O	15.297589	4.066451	-0.240006
O	10.603803	9.039010	13.827491
O	23.417255	11.309671	-0.243811
O	11.146721	3.509614	10.776838
O	13.082868	14.647324	-0.224972
O	21.529541	4.630171	13.855272
O	8.617425	12.770660	3.903343
O	13.082868	4.666959	13.889397
O	8.653928	7.926358	10.728886
O	21.529541	14.610537	-0.259097
O	14.774004	16.299854	13.870558
O	15.400209	1.079240	3.786234
O	19.247053	4.048827	-0.286878
O	11.137661	11.332483	-0.251742
O	23.418883	3.541198	10.752552
O	10.557385	16.079897	3.897659
O	15.566022	6.790231	15.387929
O	25.927539	9.147773	4.375981
O	18.982381	16.797409	1.279418
O	13.668389	17.870920	4.383700
O	20.983213	9.890579	15.348435
O	24.026741	3.884214	7.154385
O	22.316327	5.072436	1.264260
O	19.160537	18.853349	7.172793
O	15.406533	13.034852	15.401577

157

structure 1'

Si	18.73403	12.61237	13.83561
Si	21.22880	4.06074	4.75384
Si	15.65558	17.23728	7.25994
Si	10.09776	9.39805	4.75958
Si	18.70973	7.22660	13.77079
Si	15.67942	15.46018	2.23359
Si	24.29644	7.62271	7.24299
Si	22.75379	8.50468	2.21441



Si	11.63569	4.93695	7.27873
Si	20.28983	16.37915	4.75473
Si	14.13327	9.94247	13.81093
Si	18.75279	2.62406	3.72326
Si	18.74471	15.45108	12.80162
Si	15.67434	17.24434	10.29840
Si	15.69269	4.35475	1.19183
Si	11.65826	8.50934	12.77029
Si	22.76503	14.91523	3.73544
Si	22.76518	11.39585	1.22427
Si	11.61628	4.95489	10.33649
Si	13.19030	14.03793	1.24557
Si	24.29259	7.64308	10.29168
Si	21.19646	5.80309	12.78389
Si	10.09030	12.28337	3.75184
Si	24.28723	12.27219	3.75915
Si	13.15611	5.84773	12.81681
Si	10.09890	7.61209	10.30329
Si	21.24454	14.03905	1.21195
Si	15.63713	15.47234	12.80297
Si	15.65745	2.62825	3.79264
Si	18.77811	4.38119	1.21072
Si	18.75603	17.21773	10.29300
Si	11.59589	11.42683	1.21035
Si	22.76989	4.96004	10.29944
Si	22.70181	8.52265	12.76542
Si	11.65485	14.91034	3.77154
Si	15.65893	7.26376	13.82906
Si	24.29369	9.39379	4.75803
Si	10.10237	7.60741	7.23352
Si	18.74216	15.50919	2.20949
Si	14.12648	16.35076	4.76780
Si	20.26123	9.89179	13.81123
Si	11.59478	8.53285	2.19573
Si	22.75751	4.93386	7.25077
Si	21.22396	5.85405	2.22831
Si	18.75503	17.23053	7.25826
Si	13.23274	4.05445	4.85402
Si	15.62229	12.61774	13.79815
Al	13.06041	5.82109	2.26571
O	19.10741	13.86515	12.85381
O	19.68745	3.54144	4.68754
O	15.36091	16.74452	8.78202
O	14.82420	5.72702	1.63961

O	10.37667	11.00188	4.71102
O	19.63670	6.25426	12.84712
O	14.73002	14.22774	1.74487
O	24.00754	8.12338	8.76388
O	22.19364	9.94589	1.70411
O	12.16554	5.01471	8.81319
O	21.51278	15.30427	4.69450
O	12.93150	9.52066	12.79667
O	24.00198	10.99377	4.72383
O	14.67100	6.43272	12.84089
O	10.40229	8.05912	8.76960
O	19.71536	14.30172	1.70556
O	15.25779	13.88946	12.84829
O	14.75504	3.43503	4.86651
O	19.67115	5.62736	1.76494
O	19.05688	16.71737	8.77429
O	12.15234	9.99211	1.71111
O	22.19747	4.94141	8.77649
O	21.50601	9.61555	12.76873
O	12.89488	15.28769	4.75350
O	10.31236	8.09306	1.26810
O	4.95350	2.85828	4.31685
O	6.68910	3.85930	7.11045
O	12.15700	4.80513	1.20766
O	8.55162	9.09617	4.33600
O	10.25613	1.83361	1.22932
O	6.81379	1.78002	1.25822
O	8.55211	7.11308	7.09824
O	6.67739	7.99845	1.24613
O	10.41408	3.86030	7.14521
O	12.19499	2.88440	4.35719
O	4.92605	5.02966	1.22929
O	18.96638	3.06900	2.15945
O	17.19093	15.68030	13.24676
O	17.21963	17.75715	10.40484
O	15.37072	3.19790	2.27160
O	12.09590	7.01355	13.24711
O	22.28868	14.84093	2.17645
O	23.98155	11.87931	2.20336
O	10.38262	6.01563	10.51451
O	12.17870	14.86273	2.22696
O	23.98039	6.04857	10.44221
O	22.15779	7.05178	13.20255
O	10.38534	11.93462	2.18378

O	17.17526	12.19451	13.64954
O	21.44398	5.31123	3.74056
O	17.20248	16.98590	6.85361
O	13.12610	5.31370	3.89029
O	11.07234	8.61711	3.73636
O	19.09222	8.78151	13.55480
O	15.30579	15.90553	3.74874
O	23.31889	6.39438	6.83633
O	23.31506	8.60502	3.73111
O	11.07493	6.38489	6.79671
O	19.10930	15.96132	3.72180
O	15.33245	8.85296	13.76599
O	27.76735	16.02682	3.86837
O	19.67772	16.32525	13.80447
O	32.00065	18.48001	10.71527
O	23.88428	8.91175	13.82738
O	27.79150	9.01431	13.79476
O	23.96028	16.01483	3.81591
O	31.98465	16.31938	13.82272
O	19.74526	18.43396	10.70900
O	21.63626	19.58625	13.85267
O	25.84020	7.91022	10.69726
O	30.12367	19.54322	13.80432
O	25.83013	12.75714	3.88071
O	19.66281	11.35573	13.42506
O	21.52345	4.54183	6.27256
O	14.69954	16.37060	6.28095
O	12.79955	7.50039	2.06485
O	10.37671	8.88777	6.27638
O	17.16936	6.99500	13.31694
O	17.21661	14.94678	2.18229
O	24.00075	8.88123	6.26715
O	21.51553	7.44895	2.17579
O	12.90382	4.47862	6.39075
O	19.69923	16.36537	6.26628
O	14.68338	11.38335	13.32432
O	17.21550	2.85891	4.17696
O	18.99806	15.95799	11.28233
O	15.39381	15.99050	11.28655
O	17.22341	4.85947	1.22823
O	11.06516	8.49825	11.26316
O	23.31877	13.47781	4.24358
O	21.52254	12.44001	1.27986
O	12.85598	5.34100	11.30891

O	12.85447	12.45346	1.26699
O	23.33603	8.50596	11.27412
O	21.52554	5.33115	11.26871
O	11.06730	13.47955	4.25106
C	16.53555	8.13411	1.20866
C	15.54435	8.75066	1.86695
C	16.74172	7.59765	5.24438
C	17.27800	6.62304	4.50840
H	16.62608	8.19604	0.12242
H	17.30794	7.57297	1.73800
H	15.27050	6.62830	1.53914
H	15.46772	8.68708	2.95452
H	14.77507	9.33091	1.35737
H	17.18614	8.59388	5.28939
H	15.84373	7.43335	5.84309
H	16.84068	5.62344	4.48663
H	18.18259	6.77806	3.91757

187

structure 2

Si	18.871476	12.601672	13.811237
Si	21.300825	4.107880	4.800607
Si	15.724554	17.265540	7.302830
Si	10.174821	9.443912	4.821571
Si	18.810042	7.270043	13.822503
Si	15.759497	15.491865	2.273771
Si	24.394589	7.663268	7.298624
Si	22.829950	8.533963	2.262794
Si	11.750771	4.954391	7.320542
Si	20.375502	16.404436	4.807885
Si	14.233973	9.972563	13.847131
Si	18.826940	2.683401	3.763196
Si	18.817616	15.522230	12.836998
Si	15.727852	17.262182	10.340992
Si	15.769707	4.422917	1.233410
Si	11.749579	8.557692	12.811216
Si	22.842751	14.953946	3.802054
Si	22.821328	11.414966	1.271340
Si	11.701061	4.974753	10.382139
Si	13.266262	14.078923	1.283175
Si	24.375739	7.677382	10.340333
Si	21.309229	5.852099	12.836121
Si	10.160018	12.327121	3.815712
Si	24.336338	12.299108	3.811258

Si	13.263374	5.872942	12.842579
Si	10.194578	7.646282	10.351409
Si	21.299806	14.056368	1.261775
Si	15.707887	15.497885	12.833736
Si	15.753209	2.658824	3.763575
Si	18.846336	4.434225	1.245972
Si	18.827572	17.239430	10.335791
Si	11.645321	11.505085	1.242591
Si	22.834396	4.990535	10.341713
Si	22.853461	8.548295	12.830133
Si	11.721322	14.959546	3.806618
Si	15.760985	7.275451	13.842607
Si	24.361435	9.424844	4.804888
Si	10.212060	7.629655	7.283743
Si	18.822455	15.509369	2.253515
Si	14.204653	16.385718	4.810339
Si	20.323162	9.979134	13.806779
Si	11.678184	8.597222	2.253366
Si	22.828014	4.980125	7.298161
Si	21.313365	5.881615	2.256369
Si	18.834642	17.263895	7.300883
Si	13.289155	4.104254	4.863351
Si	15.732672	12.646352	13.852219
Al	13.245505	5.808887	2.288115
O	19.199200	13.948284	12.962502
O	19.760896	3.586414	4.746949
O	15.420490	16.768272	8.822209
O	14.851834	5.649180	1.693240
O	10.499392	11.037314	4.755477
O	19.765149	6.354928	12.876786
O	14.798356	14.258406	1.800396
O	24.109214	8.175132	8.813107
O	22.252163	9.974717	1.776040
O	12.263238	5.027669	8.861952
O	21.621727	15.357856	4.794787
O	13.009371	9.589289	12.844336
O	24.038490	11.016626	4.765961
O	14.790010	6.426645	12.851134
O	10.513539	8.086536	8.815411
O	19.757028	14.282565	1.729418
O	15.397510	13.902115	12.872889
O	14.815221	3.517192	4.775441
O	19.776213	5.668152	1.770494
O	19.129325	16.748714	8.817999

O	12.175362	10.037207	1.718653
O	22.256218	4.982150	8.820200
O	21.623327	9.608078	12.886068
O	12.976886	15.316201	4.775101
O	10.625485	7.881672	1.273407
O	5.033087	2.899892	4.389545
O	6.741165	3.883884	7.153993
O	12.046182	5.171715	1.242553
O	8.633645	9.159135	4.383165
O	10.346133	1.834041	1.272885
O	6.915019	1.793160	1.272516
O	8.655269	7.162130	7.144726
O	6.759026	8.056271	1.284897
O	10.521750	3.886337	7.183350
O	12.245821	2.920616	4.403173
O	5.053414	5.079430	1.271603
O	19.062801	3.132048	2.210634
O	17.263115	15.768637	13.249872
O	17.281491	17.741297	10.476200
O	15.564052	3.119585	2.211911
O	12.235367	7.065350	13.259762
O	22.317384	14.851489	2.258088
O	24.028846	11.915847	2.253540
O	10.485745	6.051883	10.560938
O	12.230591	14.873974	2.257886
O	24.038551	6.084121	10.475877
O	22.324012	7.058117	13.245135
O	10.452581	11.974202	2.245245
O	17.296637	12.243007	13.762881
O	21.534602	5.336142	3.767829
O	17.277996	17.040703	6.908566
O	13.072684	5.392843	3.943380
O	11.135705	8.652840	3.767626
O	19.170952	8.835111	13.644424
O	15.377827	15.957188	3.778055
O	23.419036	6.434922	6.898258
O	23.410057	8.615958	3.774623
O	11.183278	6.406506	6.846146
O	19.225347	15.941646	3.760105
O	15.410358	8.858630	13.778587
O	27.848919	16.082357	3.895132
O	19.729779	16.418962	13.842660
O	32.064432	18.506910	10.749637
O	24.066450	8.934226	13.829177

O	27.877287	9.024947	13.838232
O	24.039956	16.043912	3.862213
O	32.049881	16.301488	13.876533
O	19.794394	18.468117	10.764287
O	21.723381	19.619045	13.889079
O	25.930966	7.911937	10.740859
O	30.176725	19.591025	13.868161
O	25.890282	12.750231	3.936173
O	19.726979	11.380308	13.194188
O	21.592163	4.624537	6.309590
O	14.797622	16.373519	6.317046
O	13.093531	7.681894	2.305948
O	10.499890	8.907209	6.313572
O	17.278459	7.020814	13.342648
O	17.290977	14.965521	2.255334
O	24.082662	8.909936	6.311462
O	21.604271	7.477687	2.218857
O	13.017210	4.494770	6.427097
O	19.755048	16.381036	6.306458
O	14.830353	11.397354	13.357241
O	17.293237	2.891727	4.224814
O	19.109693	15.970024	11.308958
O	15.416614	16.012299	11.326593
O	17.315809	4.930563	1.282147
O	11.156118	8.546364	11.301008
O	23.394031	13.514082	4.313672
O	21.579359	12.456238	1.297123
O	12.947742	5.330718	11.353070
O	12.926472	12.489680	1.302849
O	23.421584	8.558647	11.305249
O	21.598118	5.341225	11.324684
O	11.112629	13.539875	4.307765
H	15.656776	7.876380	1.272827
H	13.931224	9.249535	3.426577
H	16.082180	9.339557	2.201293
H	14.749052	9.404827	1.027698
H	14.738287	7.668596	3.584646
C	14.306369	8.380831	2.871451
C	15.250824	8.766832	1.765027
O	19.268736	12.871855	15.387776
O	22.319588	2.899892	4.389545
O	15.384415	18.854433	7.153993
O	18.989383	6.824224	15.387254
O	15.558269	16.763709	1.272516

O	25.941770	7.162130	7.144726
O	24.045527	8.056271	1.284897
O	20.889072	17.891165	4.403173
O	13.696665	10.069613	15.385972
O	19.205669	1.111808	3.895132
O	14.777931	18.506910	10.749637
O	15.423199	3.944043	-0.285192
O	10.590786	9.024947	13.838232
O	23.406631	11.311305	-0.237836
O	11.151144	3.497568	10.764287
O	13.080130	14.628862	-0.225290
O	21.533474	4.620476	13.868161
O	8.603781	12.750231	3.936173
O	13.080130	4.648496	13.889079
O	8.644466	7.911937	10.740859
O	21.533474	14.600842	-0.246208
O	14.763380	16.301488	13.876533
O	15.396705	1.073363	3.862213
O	19.234037	4.034764	-0.276136
O	11.086528	11.428779	-0.271709
O	23.421181	3.536361	10.749637
O	10.562418	16.082357	3.895132
O	15.558269	6.783343	15.386885
O	25.920146	9.159135	4.383165
O	18.989383	16.804590	1.272885
O	13.676338	17.870441	4.389545
O	20.689432	10.161898	15.356921
O	24.027666	3.883884	7.153993
O	22.339915	5.079430	1.271603
O	19.165001	18.856886	7.183350
O	15.402277	13.046454	15.399266

157

structure 2'

Si	18.77535	12.57393	13.75706
Si	21.23198	4.06478	4.75379
Si	15.65929	17.24457	7.26383
Si	10.09492	9.39069	4.76215
Si	18.72848	7.22961	13.75808
Si	15.68848	15.46993	2.23242
Si	24.30233	7.62414	7.24815
Si	22.74965	8.50871	2.21980
Si	11.66264	4.92879	7.27533
Si	20.28730	16.38531	4.75424



Si	14.14058	9.94727	13.81360
Si	18.74774	2.63769	3.72799
Si	18.74667	15.48044	12.79839
Si	15.67526	17.25518	10.30436
Si	15.68626	4.33982	1.18009
Si	11.65603	8.51545	12.78666
Si	22.76457	14.92624	3.76157
Si	22.76631	11.40264	1.23486
Si	11.62158	4.95970	10.33501
Si	13.20560	14.04839	1.24559
Si	24.29077	7.65171	10.29865
Si	21.20613	5.80943	12.79055
Si	10.09444	12.28988	3.75372
Si	24.28459	12.27725	3.76960
Si	13.16218	5.85511	12.81929
Si	10.09785	7.61714	10.31204
Si	21.26008	14.05582	1.22381
Si	15.64142	15.47899	12.80787
Si	15.67814	2.63515	3.74425
Si	18.75343	4.40013	1.21917
Si	18.75437	17.22810	10.29034
Si	11.58633	11.47022	1.19241
Si	22.77256	4.97016	10.30074
Si	22.76694	8.51932	12.79821
Si	11.65826	14.92082	3.77646
Si	15.66823	7.26934	13.82674
Si	24.28987	9.39660	4.76326
Si	10.11223	7.59614	7.24074
Si	18.75077	15.52938	2.20509
Si	14.13005	16.35428	4.77218
Si	20.24308	9.94777	13.76525
Si	11.59829	8.55778	2.19193
Si	22.75764	4.94010	7.25329
Si	21.22875	5.85243	2.22970
Si	18.75918	17.23171	7.25674
Si	13.20992	4.10069	4.81254
Si	15.63113	12.62541	13.80929
Al	13.12253	5.75080	2.22426
O	19.13711	13.90495	12.89293
O	19.69324	3.54601	4.69404
O	15.36862	16.75250	8.78767
O	14.71325	5.53085	1.60760
O	10.40391	10.98546	4.68119
O	19.63478	6.22688	12.84904

O	14.74648	14.23153	1.73584
O	24.02208	8.13149	8.76597
O	22.19368	9.95368	1.71504
O	12.18176	5.00755	8.81399
O	21.48781	15.28767	4.70042
O	12.93456	9.52571	12.80484
O	24.00178	10.99565	4.73125
O	14.68079	6.43248	12.84111
O	10.40296	8.06167	8.77313
O	19.72780	14.32046	1.71165
O	15.27952	13.89195	12.84748
O	14.75226	3.55776	4.71183
O	19.68655	5.62618	1.76286
O	19.04959	16.71849	8.77537
O	12.10678	10.00186	1.67599
O	22.19592	4.95317	8.77856
O	21.60537	9.65031	12.90622
O	12.89886	15.28853	4.76163
O	10.52083	7.86915	1.21776
O	4.95767	2.85895	4.32064
O	6.69203	3.86612	7.12133
O	11.88262	5.11318	1.22299
O	8.55275	9.09665	4.33643
O	10.26926	1.85476	1.22422
O	6.81802	1.78659	1.25642
O	8.55960	7.11687	7.09426
O	6.68136	8.01281	1.25387
O	10.43752	3.85538	7.14338
O	12.20274	2.88611	4.35709
O	4.95130	5.04378	1.23461
O	18.96391	3.08478	2.16941
O	17.19732	15.69316	13.25421
O	17.22049	17.76948	10.42121
O	15.51599	3.04226	2.17455
O	12.10787	7.01924	13.26071
O	22.30412	14.85198	2.19520
O	23.98622	11.88099	2.21346
O	10.38508	6.01759	10.50649
O	12.19120	14.85542	2.23398
O	23.98903	6.05207	10.43554
O	22.14852	7.06601	13.21316
O	10.38142	11.94677	2.17880
O	17.19634	12.22703	13.69172
O	21.46424	5.31216	3.74170

O	17.20581	16.99859	6.85307
O	12.96110	5.38224	3.89230
O	11.06523	8.60122	3.71321
O	19.14823	8.76808	13.50062
O	15.30593	15.90552	3.74867
O	23.32140	6.40089	6.83573
O	23.31719	8.60815	3.73546
O	11.08935	6.37796	6.80691
O	19.09938	15.98515	3.72051
O	15.33898	8.85660	13.76102
O	27.77560	16.03632	3.86419
O	19.68503	16.37102	13.78632
O	31.99818	18.48714	10.71949
O	24.02754	8.82322	13.77214
O	27.79331	9.01930	13.80666
O	23.93906	16.03287	3.90754
O	31.99173	16.31536	13.83571
O	19.74887	18.43785	10.70871
O	21.64554	19.58417	13.85042
O	25.83987	7.91823	10.70737
O	30.13979	19.55089	13.81448
O	25.83444	12.74542	3.89565
O	19.62756	11.34186	13.16237
O	21.52734	4.54399	6.27452
O	14.70702	16.37304	6.28472
O	12.99756	7.62109	2.18698
O	10.40387	8.86627	6.26287
O	17.18145	7.01021	13.31871
O	17.22618	14.96152	2.17182
O	24.01116	8.88504	6.27190
O	21.52091	7.44969	2.17759
O	12.93154	4.48178	6.37686
O	19.69789	16.36376	6.26610
O	14.70881	11.38471	13.32390
O	17.21956	2.85241	4.21488
O	18.99736	15.96030	11.27405
O	15.39852	15.99804	11.29257
O	17.21903	4.89549	1.25002
O	11.07269	8.49152	11.27247
O	23.32141	13.48220	4.25687
O	21.53028	12.45268	1.28895
O	12.85694	5.34525	11.31282
O	12.86933	12.45576	1.27482
O	23.30605	8.50067	11.26289

O	21.53175	5.33755	11.27412
O	11.07152	13.48253	4.25263
C	15.11169	8.74838	1.53140
C	14.26076	8.28890	2.68550
C	16.75629	7.67730	5.14586
C	17.09876	6.81041	4.19184
H	14.59959	9.50322	0.92330
H	16.02592	9.20069	1.94216
H	15.40505	7.89725	0.90577
H	14.76455	7.53357	3.29610
H	13.94182	9.10977	3.33979
H	17.16197	8.69046	5.17630
H	16.05450	7.40590	5.93695
H	16.68702	5.79998	4.17082
H	17.79322	7.06875	3.39034

157

structure 3

Si	18.75794	12.61103	13.80999
Si	21.23520	4.06658	4.75195
Si	15.66475	17.24706	7.25788
Si	10.09878	9.40007	4.75514
Si	18.72027	7.23549	13.74853
Si	15.68929	15.46708	2.23136
Si	24.30248	7.63090	7.24570
Si	22.74732	8.51567	2.21914
Si	11.66470	4.93766	7.26782
Si	20.29581	16.39373	4.74960
Si	14.13999	9.95105	13.80484
Si	18.75422	2.63639	3.72127
Si	18.75674	15.46850	12.80093
Si	15.68184	17.25582	10.30105
Si	15.66693	4.37019	1.19870
Si	11.65338	8.52220	12.78117
Si	22.76871	14.92521	3.75585
Si	22.76704	11.40640	1.22766
Si	11.62961	4.96826	10.32632
Si	13.20270	14.04298	1.24447
Si	24.28888	7.65654	10.29525
Si	21.21539	5.82104	12.79091
Si	10.09393	12.29052	3.75118
Si	24.29125	12.28349	3.76232
Si	13.15822	5.85948	12.81751

Si	10.10019	7.62296	10.30473
Si	21.25953	14.05846	1.21919
Si	15.65281	15.48485	12.80703
Si	15.68143	2.62982	3.74535
Si	18.75129	4.40445	1.22174
Si	18.76033	17.23094	10.28997
Si	11.60799	11.43232	1.21418
Si	22.77600	4.97145	10.29727
Si	22.75575	8.53329	12.80073
Si	11.66075	14.91664	3.77598
Si	15.66911	7.27026	13.82250
Si	24.29740	9.40285	4.75968
Si	10.10949	7.60660	7.23284
Si	18.75103	15.53261	2.20095
Si	14.12985	16.35191	4.77195
Si	20.24140	9.91741	13.80612
Si	11.63215	8.52347	2.19971
Si	22.76052	4.94392	7.24998
Si	21.22511	5.86091	2.22914
Si	18.76469	17.23495	7.25464
Si	13.23121	4.10082	4.81072
Si	15.63300	12.62632	13.80356
Al	13.09256	5.80793	2.20543
O	19.10854	13.88321	12.84271
O	19.68805	3.56349	4.68726
O	15.37633	16.75669	8.78175
O	14.74473	5.58140	1.66586
O	10.37624	11.00646	4.71107
O	19.64527	6.24403	12.84289
O	14.74689	14.23056	1.73508
O	24.01216	8.13654	8.76306
O	22.18672	9.95872	1.71074
O	12.19193	5.02476	8.80483
O	21.49726	15.29616	4.69668
O	12.93730	9.52477	12.79293
O	24.01004	11.00349	4.72667
O	14.67405	6.44491	12.83578
O	10.41048	8.06399	8.76758
O	19.72675	14.32047	1.70944
O	15.28416	13.89931	12.84754
O	14.77727	3.53776	4.75102
O	19.66574	5.64062	1.79500
O	19.05052	16.71826	8.77226
O	12.16139	10.00296	1.72863

O	22.19573	4.95042	8.77455
O	21.56331	9.63142	12.86982
O	12.89691	15.28964	4.76774
O	10.38257	8.05627	1.24566
O	4.95411	2.85824	4.32098
O	6.68939	3.86653	7.10560
O	11.95787	4.91266	1.24977
O	8.55242	9.09667	4.33647
O	10.25628	1.85137	1.21352
O	6.82992	1.78158	1.25117
O	8.55759	7.11697	7.09791
O	6.66326	8.00497	1.24907
O	10.44454	3.85896	7.14269
O	12.21666	2.89336	4.35858
O	4.92833	5.04966	1.22128
O	18.97039	3.08502	2.16317
O	17.20503	15.70624	13.25021
O	17.22520	17.77195	10.41491
O	15.51309	3.05811	2.18289
O	12.09805	7.02368	13.25047
O	22.30395	14.85217	2.19164
O	23.98305	11.88470	2.20840
O	10.39802	6.02788	10.50548
O	12.19830	14.86128	2.23659
O	23.99001	6.05545	10.41979
O	22.17102	7.06405	13.22010
O	10.39666	11.94633	2.18420
O	17.18716	12.21106	13.67549
O	21.46509	5.31640	3.74028
O	17.21112	17.00522	6.84501
O	13.04711	5.38710	3.89436
O	11.07404	8.62585	3.73167
O	19.10687	8.78024	13.48866
O	15.30566	15.90563	3.74831
O	23.31917	6.40686	6.83251
O	23.31248	8.61891	3.73487
O	11.08909	6.38638	6.79907
O	19.11124	15.99093	3.71330
O	15.33862	8.85915	13.76604
O	27.78205	16.04018	3.86221
O	19.69587	16.33557	13.80600
O	32.00114	18.48755	10.70863
O	24.00239	8.87043	13.78764
O	27.79756	9.03729	13.80947

O	23.95088	16.02624	3.89648
O	31.99301	16.32029	13.82970
O	19.75121	18.44929	10.69301
O	21.64593	19.59435	13.85303
O	25.84092	7.91519	10.69561
O	30.13726	19.55789	13.81193
O	25.83527	12.76906	3.87669
O	19.65141	11.36054	13.31326
O	21.52219	4.55415	6.27224
O	14.71150	16.37137	6.28248
O	12.87481	7.53641	2.13117
O	10.38599	8.88664	6.27178
O	17.17534	6.99702	13.30197
O	17.22762	14.95647	2.18513
O	24.00569	8.88864	6.26777
O	21.50576	7.46175	2.19065
O	12.93725	4.48796	6.37452
O	19.70233	16.36740	6.26099
O	14.70061	11.38910	13.31647
O	17.22686	2.86226	4.20896
O	19.00820	15.97479	11.28047
O	15.40066	16.00199	11.29040
O	17.21822	4.90687	1.27382
O	11.06535	8.50531	11.26978
O	23.31958	13.48191	4.25490
O	21.52667	12.45372	1.28289
O	12.86440	5.34842	11.30795
O	12.87030	12.45725	1.27177
O	23.31666	8.50572	11.27033
O	21.53899	5.34431	11.27359
O	11.07150	13.48503	4.25595
C	15.84538	8.80434	2.29809
C	15.51720	7.95284	3.50947
C	16.56127	7.86581	4.96338
C	16.77932	6.94863	3.92341
H	14.94817	9.36892	2.01625
H	16.66538	9.50828	2.49112
H	16.11436	8.14883	1.46216
H	14.74867	7.17877	3.39430
H	15.00219	8.56550	4.29217
H	17.10517	8.80877	5.01887
H	15.96513	7.57856	5.83185
H	16.43515	5.92093	4.02509
H	17.57934	7.11938	3.20290

157

structure 4

Si	18.75914	12.63014	13.85884
Si	21.23498	4.07296	4.76829
Si	15.65887	17.25245	7.28222
Si	10.06825	9.43977	4.80238
Si	18.73409	7.28082	13.83713
Si	15.67807	15.46367	2.25181
Si	24.29753	7.63992	7.26666
Si	22.75940	8.52445	2.21883
Si	11.63336	4.94867	7.29374
Si	20.29793	16.41556	4.77441
Si	14.15136	9.95269	13.81476
Si	18.75624	2.65334	3.73265
Si	18.75917	15.46130	12.82306
Si	15.67874	17.27219	10.33322
Si	15.70715	4.46868	1.21990
Si	11.69486	8.52335	12.77120
Si	22.77916	14.96712	3.74464
Si	22.75760	11.40743	1.24326
Si	11.63449	4.95727	10.35431
Si	13.18374	14.05291	1.26488
Si	24.30704	7.67909	10.31070
Si	21.24410	5.86312	12.81428
Si	10.07732	12.30958	3.78857
Si	24.26374	12.30265	3.80350
Si	13.20754	5.84532	12.81775
Si	10.11958	7.60785	10.32248
Si	21.22455	14.05194	1.22860
Si	15.64648	15.48190	12.82268
Si	15.65733	2.66883	3.77927
Si	18.81084	4.38195	1.21029
Si	18.76050	17.22937	10.32127
Si	11.58446	11.44476	1.24700
Si	22.76464	4.98402	10.32445
Si	22.72440	8.56665	12.77905
Si	11.64449	14.93457	3.79092
Si	15.68854	7.25625	13.82429
Si	24.26603	9.43646	4.78519
Si	10.10453	7.61157	7.25087
Si	18.73847	15.48721	2.24523
Si	14.12649	16.35672	4.79192
Si	20.29926	9.92139	13.84248



Si	11.57356	8.56076	2.24937
Si	22.75525	4.94680	7.27420
Si	21.24852	5.85848	2.23306
Si	18.75424	17.24522	7.28185
Si	13.23080	4.06066	4.86755
Si	15.64451	12.63219	13.81309
Al	13.14036	5.87478	2.30210
O	19.14520	13.88093	12.88078
O	19.68753	3.56886	4.70357
O	15.37531	16.77890	8.81255
O	14.93892	5.89189	1.71189
O	10.36718	11.04013	4.76254
O	19.71311	6.40003	12.88069
O	14.72266	14.23406	1.77095
O	24.02067	8.16147	8.78388
O	22.17759	9.95381	1.69894
O	12.16780	5.03334	8.82613
O	21.56979	15.39773	4.74125
O	12.93535	9.57113	12.80126
O	23.96023	11.03697	4.78309
O	14.73921	6.38848	12.82842
O	10.42896	8.03747	8.78681
O	19.68726	14.27389	1.71454
O	15.26877	13.89839	12.85879
O	14.72794	3.38465	4.89449
O	19.70182	5.62965	1.75666
O	19.04195	16.72872	8.79949
O	12.13537	10.01582	1.76382
O	22.19370	4.94081	8.80054
O	21.44543	9.56239	12.71955
O	12.88862	15.30055	4.77360
O	10.31919	8.09978	1.29606
O	4.95201	2.86042	4.33749
O	6.68741	3.87320	7.12660
O	12.32444	4.85042	1.18788
O	8.52410	9.15795	4.35674
O	10.25892	1.81560	1.27632
O	6.84197	1.76757	1.25110
O	8.55241	7.12139	7.13025
O	6.69361	8.02200	1.25965
O	10.40647	3.87603	7.17988
O	12.14145	2.94012	4.35319
O	4.95918	5.03738	1.23846
O	18.99479	3.07915	2.16924

O	17.20245	15.68026	13.25842
O	17.22719	17.77415	10.46077
O	15.34507	3.31278	2.29303
O	12.19505	7.04945	13.24879
O	22.24184	14.86360	2.20986
O	23.94388	11.88668	2.25730
O	10.40516	6.01646	10.55473
O	12.16382	14.87148	2.24441
O	23.95486	6.09273	10.45918
O	22.28699	7.05639	13.21613
O	10.37696	11.95011	2.22445
O	17.20027	12.21557	13.66202
O	21.46388	5.31326	3.74546
O	17.20387	16.99778	6.87120
O	13.19831	5.33337	3.91573
O	11.02546	8.64682	3.77730
O	19.07027	8.85629	13.71935
O	15.29889	15.91501	3.76329
O	23.31295	6.41295	6.87013
O	23.30577	8.65360	3.73816
O	11.07422	6.39302	6.79599
O	19.13318	15.92363	3.75576
O	15.32227	8.83541	13.75067
O	27.75796	16.05353	3.88690
O	19.67405	16.33920	13.83891
O	32.00701	18.51044	10.75270
O	23.83998	9.06624	13.86481
O	27.81827	8.99287	13.80072
O	23.99845	16.04520	3.73563
O	32.01020	16.32610	13.85679
O	19.76372	18.43749	10.73001
O	21.65522	19.60023	13.86852
O	25.86218	7.90852	10.71120
O	30.10376	19.59293	13.83602
O	25.81374	12.76834	3.90559
O	19.71407	11.38895	13.45445
O	21.52563	4.55828	6.28709
O	14.70558	16.37837	6.30412
O	12.78469	7.53770	2.16045
O	10.35378	8.90997	6.31165
O	17.21227	7.02514	13.33497
O	17.21072	14.93536	2.22607
O	23.98941	8.88820	6.28279
O	21.53551	7.45333	2.17999

O	12.89494	4.48143	6.40265
O	19.70834	16.39463	6.28639
O	14.72341	11.38676	13.33547
O	17.21470	2.91387	4.15591
O	19.01098	15.96492	11.30282
O	15.38553	16.01617	11.31522
O	17.26374	4.87440	1.22546
O	11.09035	8.50057	11.27035
O	23.32595	13.53647	4.27678
O	21.51986	12.45636	1.27217
O	12.88269	5.33507	11.31729
O	12.84256	12.47073	1.28199
O	23.39523	8.57986	11.30290
O	21.52327	5.35618	11.29842
O	11.04813	13.51234	4.28050
C	16.88590	10.24351	0.66581
C	15.54366	9.61978	1.04547
C	15.63795	7.21724	1.88523
C	15.39312	8.12169	0.68861
H	16.90420	11.31197	0.92285
H	17.73365	9.76568	1.17697
H	25.70118	15.15349	13.69733
H	14.73775	10.17566	0.54645
H	15.35494	9.75820	2.12280
H	16.69409	6.98855	2.06234
H	15.19343	7.63938	2.79410
H	14.36671	7.94095	0.34763
H	16.06573	7.84938	-0.13925

187

structure TS1

Si	18.876452	12.620712	13.844379
Si	21.300483	4.109920	4.800390
Si	15.728011	17.268039	7.304520
Si	10.190111	9.438353	4.804817
Si	18.814684	7.277331	13.832666
Si	15.759577	15.492313	2.273195
Si	24.398196	7.661389	7.296928
Si	22.836177	8.537213	2.260886
Si	11.754777	4.957093	7.321514
Si	20.381586	16.410150	4.805808
Si	14.239319	9.976954	13.845891
Si	18.832494	2.682662	3.756500
Si	18.824971	15.500781	12.834216

Si	15.731370	17.264471	10.343910
Si	15.780047	4.453189	1.233538
Si	11.760137	8.559778	12.799855
Si	22.850852	14.957717	3.792406
Si	22.826010	11.415707	1.266940
Si	11.717618	4.976255	10.375395
Si	13.263753	14.086629	1.281455
Si	24.385782	7.674339	10.338547
Si	21.310780	5.856732	12.837093
Si	10.168728	12.319696	3.810783
Si	24.345787	12.301718	3.809040
Si	13.274156	5.878907	12.836115
Si	10.204768	7.649974	10.342434
Si	21.297752	14.052631	1.256862
Si	15.718931	15.497461	12.835445
Si	15.743014	2.673147	3.778527
Si	18.869850	4.427245	1.239772
Si	18.832199	17.245039	10.337970
Si	11.665515	11.484774	1.255016
Si	22.835334	4.990432	10.341617
Si	22.842365	8.551033	12.826482
Si	11.720805	14.958698	3.807442
Si	15.769557	7.281975	13.840373
Si	24.371674	9.428721	4.802789
Si	10.211564	7.632829	7.277809
Si	18.821032	15.503774	2.258675
Si	14.204460	16.387129	4.810944
Si	20.355240	9.966146	13.848255
Si	11.761832	8.580248	2.263681
Si	22.827652	4.979926	7.298531
Si	21.321811	5.885981	2.256998
Si	18.839276	17.266146	7.302225
Si	13.306764	4.098280	4.869457
Si	15.742897	12.644277	13.852071
Al	13.271069	5.909909	2.308400
O	19.181325	13.917558	12.905374
O	19.756791	3.594291	4.740952
O	15.422389	16.772691	8.824199
O	14.926835	5.764263	1.679261
O	10.498558	11.038658	4.760796
O	19.769353	6.366794	12.880219
O	14.797145	14.261008	1.800209
O	24.111721	8.174517	8.813009
O	22.254295	9.975257	1.769436

O	12.284279	5.019794	8.858134
O	21.631853	15.364848	4.787327
O	13.015718	9.592687	12.843049
O	24.040289	11.020382	4.763727
O	14.798570	6.438496	12.844266
O	10.512171	8.096639	8.808546
O	19.756542	14.280287	1.728193
O	15.405144	13.902093	12.875788
O	14.823599	3.475081	4.843823
O	19.780167	5.671717	1.772145
O	19.132621	16.750132	8.819319
O	12.247735	10.058203	1.768435
O	22.254772	4.978361	8.820590
O	21.599108	9.590768	12.846834
O	12.974911	15.319627	4.778636
O	10.604209	7.997946	1.280112
O	5.028926	2.900374	4.387760
O	6.740994	3.885055	7.153487
O	12.187505	5.074803	1.258962
O	8.639071	9.164117	4.380354
O	10.337805	1.824642	1.277863
O	6.920975	1.791930	1.268324
O	8.656017	7.153448	7.147870
O	6.759384	8.050929	1.283887
O	10.526366	3.888352	7.188949
O	12.247600	2.928494	4.402602
O	5.053976	5.080399	1.270314
O	19.079428	3.125176	2.200736
O	17.272030	15.766940	13.252975
O	17.284716	17.746006	10.475347
O	15.494777	3.215679	2.255675
O	12.241988	7.069639	13.251273
O	22.317414	14.841336	2.254381
O	24.027108	11.917742	2.253306
O	10.506579	6.058446	10.550020
O	12.229918	14.883404	2.257721
O	24.040462	6.083314	10.474428
O	22.331832	7.058376	13.250059
O	10.464611	11.968988	2.242378
O	17.303323	12.232144	13.770470
O	21.533735	5.340166	3.768517
O	17.281751	17.046064	6.910628
O	13.171739	5.378904	3.934867
O	11.155035	8.654706	3.766849

O	19.179495	8.842782	13.697453
O	15.376309	15.959694	3.776659
O	23.417764	6.434588	6.898874
O	23.414013	8.623021	3.772248
O	11.185773	6.408358	6.853571
O	19.230195	15.936638	3.763373
O	15.416200	8.864929	13.781617
O	27.846256	16.082818	3.897857
O	19.746603	16.361603	13.858170
O	32.064132	18.507278	10.754297
O	24.034024	8.977205	13.846234
O	27.887860	9.028123	13.830397
O	24.044905	16.056058	3.816859
O	32.056683	16.303951	13.873658
O	19.797774	18.476898	10.761770
O	21.733227	19.632492	13.888183
O	25.940810	7.906414	10.739772
O	30.177877	19.592878	13.865524
O	25.899553	12.748987	3.923769
O	19.760230	11.386104	13.297570
O	21.590957	4.623866	6.309832
O	14.800033	16.377849	6.316887
O	13.106962	7.673281	2.255862
O	10.494265	8.904673	6.306189
O	17.286601	7.032644	13.335739
O	17.289345	14.959740	2.262233
O	24.088830	8.907273	6.308425
O	21.604740	7.481741	2.217847
O	13.016668	4.503011	6.423595
O	19.758400	16.384274	6.304463
O	14.827658	11.402598	13.355073
O	17.293951	2.905063	4.194335
O	19.123719	15.985110	11.317277
O	15.422498	16.014022	11.328775
O	17.333623	4.925931	1.274431
O	11.164072	8.556013	11.291748
O	23.417874	13.528495	4.314122
O	21.579929	12.453276	1.285892
O	12.964444	5.336004	11.345410
O	12.928528	12.500281	1.289698
O	23.449072	8.556329	11.319221
O	21.600271	5.347458	11.325121
O	11.115493	13.539514	4.305291
H	15.510434	7.117798	1.569137

H	14.362149	9.648286	2.251572
H	16.898133	7.949344	2.111356
H	16.022878	8.694081	0.659523
H	15.017526	8.544701	3.590325
C	15.007142	8.818419	2.533401
C	15.945164	8.258349	1.658170
O	19.247459	12.988129	15.394481
O	22.315426	2.900374	4.387760
O	15.384244	18.855604	7.153487
O	18.981055	6.814825	15.392232
O	15.564225	16.762479	1.268324
O	25.942518	7.153448	7.147870
O	24.045885	8.050929	1.283887
O	20.890850	17.899043	4.402602
O	13.697227	10.070582	15.384682
O	19.203005	1.112269	3.897857
O	14.777632	18.507278	10.754297
O	15.390773	3.987022	-0.268135
O	10.601359	9.028123	13.830397
O	23.413432	11.313768	-0.240711
O	11.154523	3.506349	10.761770
O	13.089976	14.642309	-0.226186
O	21.534627	4.622329	13.865524
O	8.613053	12.748987	3.923769
O	13.089976	4.661943	13.888183
O	8.654309	7.906414	10.739772
O	21.534627	14.602695	-0.248844
O	14.770182	16.303951	13.873658
O	15.401654	1.085509	3.816859
O	19.244610	4.037940	-0.283972
O	11.103353	11.371420	-0.256199
O	23.420882	3.536729	10.754297
O	10.559755	16.082818	3.897857
O	15.564225	6.782113	15.382693
O	25.925572	9.164117	4.380354
O	18.981055	16.795191	1.277863
O	13.672176	17.870923	4.387760
O	20.830755	10.064986	15.373331
O	24.027495	3.885055	7.153487
O	22.340477	5.080399	1.270314
O	19.169616	18.858901	7.188949
O	15.402635	13.041112	15.398256

## structure TS2

Si	18.77327	12.59417	13.79058
Si	21.23185	4.06288	4.75566
Si	15.65805	17.23938	7.26120
Si	10.09861	9.39781	4.75639
Si	18.72265	7.22543	13.75070
Si	15.68659	15.46394	2.23288
Si	24.30330	7.62503	7.24785
Si	22.74466	8.51064	2.22242
Si	11.66284	4.92661	7.26613
Si	20.28582	16.37980	4.75142
Si	14.13988	9.95045	13.81474
Si	18.74939	2.63298	3.73169
Si	18.74958	15.47263	12.80059
Si	15.67673	17.25018	10.29897
Si	15.67184	4.33886	1.19404
Si	11.65262	8.51918	12.78480
Si	22.76357	14.91578	3.75616
Si	22.76342	11.40084	1.22897
Si	11.62723	4.96438	10.32583
Si	13.19747	14.04752	1.24119
Si	24.29184	7.65256	10.29813
Si	21.20650	5.80960	12.78945
Si	10.09054	12.28310	3.75151
Si	24.28731	12.27598	3.76180
Si	13.15942	5.85512	12.81263
Si	10.10359	7.62444	10.30573
Si	21.25716	14.05245	1.21970
Si	15.64752	15.47988	12.80673
Si	15.67720	2.61649	3.75077
Si	18.75061	4.39563	1.22437
Si	18.75769	17.22935	10.28816
Si	11.60564	11.43448	1.20934
Si	22.77517	4.96930	10.29976
Si	22.75782	8.52519	12.79764
Si	11.65791	14.91628	3.76735
Si	15.66663	7.26655	13.82584
Si	24.29536	9.39666	4.76206
Si	10.11255	7.59948	7.23483
Si	18.74632	15.52719	2.20188
Si	14.12805	16.34988	4.76979
Si	20.23827	9.92963	13.77494
Si	11.66683	8.53103	2.20433
Si	22.76045	4.93907	7.25241



Si	21.22475	5.85752	2.23341
Si	18.76112	17.22543	7.25438
Si	13.21774	4.08408	4.81119
Si	15.63638	12.62255	13.80925
Al	13.09132	5.79337	2.21316
O	19.10716	13.88930	12.85354
O	19.68767	3.55186	4.69862
O	15.36428	16.74511	8.78315
O	14.72071	5.53536	1.64231
O	10.37759	11.00294	4.71547
O	19.63279	6.21904	12.84779
O	14.73865	14.22875	1.74144
O	24.01650	8.13084	8.76566
O	22.18647	9.95372	1.71284
O	12.18556	5.00785	8.80406
O	21.48979	15.28595	4.69488
O	12.92879	9.53132	12.81022
O	24.00695	10.99605	4.72615
O	14.67648	6.43479	12.84022
O	10.41174	8.06512	8.76739
O	19.72580	14.31882	1.70957
O	15.29267	13.89114	12.84565
O	14.75861	3.51660	4.74723
O	19.67389	5.63009	1.77959
O	19.05529	16.71687	8.77336
O	12.18168	10.00032	1.70500
O	22.19730	4.95182	8.77699
O	21.58691	9.64573	12.88186
O	12.90201	15.27889	4.75234
O	10.47967	7.98073	1.23010
O	4.95347	2.85691	4.32098
O	6.68876	3.86040	7.11109
O	11.91192	5.00677	1.22732
O	8.55291	9.09635	4.33653
O	10.25817	1.85024	1.21848
O	6.82552	1.77939	1.25472
O	8.55985	7.11444	7.09818
O	6.66349	8.00543	1.25073
O	10.44387	3.84739	7.13070
O	12.19774	2.88121	4.35719
O	4.94631	5.05403	1.23594
O	18.97010	3.08258	2.17461
O	17.19943	15.70895	13.25257
O	17.22121	17.76688	10.40536

O	15.51040	3.03795	2.18589
O	12.10123	7.01953	13.24805
O	22.30257	14.84508	2.19072
O	23.98236	11.88040	2.20609
O	10.39917	6.02850	10.50529
O	12.18495	14.86709	2.22330
O	23.98920	6.05295	10.43593
O	22.14859	7.06610	13.21086
O	10.38992	11.91418	2.18763
O	17.19573	12.21561	13.70808
O	21.45940	5.31301	3.74480
O	17.20570	16.99254	6.85502
O	13.01295	5.36091	3.88738
O	11.07772	8.63704	3.71784
O	19.13271	8.76185	13.47782
O	15.30604	15.90580	3.74851
O	23.32126	6.40049	6.83552
O	23.31409	8.61082	3.73723
O	11.08816	6.37711	6.80333
O	19.09836	15.98029	3.71728
O	15.33310	8.85330	13.76559
O	27.77724	16.03503	3.86788
O	19.69418	16.33682	13.80320
O	32.00137	18.48536	10.70888
O	24.00929	8.83678	13.78392
O	27.79127	9.02149	13.81157
O	23.94966	16.01092	3.89671
O	31.98360	16.31050	13.82836
O	19.74566	18.44712	10.69768
O	21.64632	19.58689	13.84577
O	25.84333	7.91573	10.69674
O	30.13924	19.55015	13.81231
O	25.83246	12.75992	3.87719
O	19.63116	11.34714	13.22678
O	21.52562	4.54632	6.27495
O	14.70486	16.36720	6.28224
O	12.96147	7.56758	2.18475
O	10.39714	8.87207	6.26412
O	17.17550	7.00117	13.30963
O	17.22324	14.94913	2.17815
O	24.00925	8.88476	6.27130
O	21.50413	7.45807	2.19490
O	12.93554	4.48101	6.37341
O	19.69652	16.35250	6.26379

O	14.70750	11.38463	13.32114
O	17.22056	2.85392	4.21633
O	19.00540	15.97349	11.28101
O	15.39769	15.99679	11.29034
O	17.21456	4.89195	1.26980
O	11.07064	8.50634	11.27041
O	23.31610	13.47297	4.25415
O	21.52384	12.44822	1.28516
O	12.86538	5.34640	11.30280
O	12.86296	12.46030	1.27300
O	23.31708	8.50505	11.26841
O	21.53412	5.33615	11.27316
O	11.07149	13.47960	4.23761
C	15.54613	8.77936	2.04088
C	14.96121	8.03658	3.17162
C	16.61632	8.01059	4.94740
C	17.00769	7.02049	4.11535
H	14.75420	9.41143	1.60790
H	16.32868	9.47785	2.37098
H	15.93798	8.10107	1.27648
H	14.93051	6.95703	3.18366
H	14.45388	8.55195	3.98818
H	16.99239	9.02935	4.84634
H	15.97012	7.80228	5.80180
H	16.67087	5.99239	4.26552
H	17.69030	7.19061	3.28127

157

structure TS3

Si	18.82710	12.61023	13.92874
Si	21.26181	4.07702	4.81542
Si	15.68071	17.24672	7.32732
Si	10.10510	9.41707	4.86481
Si	18.77557	7.28239	13.85337
Si	15.71570	15.46240	2.28959
Si	24.31017	7.63983	7.33017
Si	22.79625	8.50369	2.27385
Si	11.65760	4.94531	7.33448
Si	20.34184	16.41961	4.81203
Si	14.18299	9.94885	13.84729
Si	18.78077	2.64202	3.78100
Si	18.80979	15.46684	12.87922
Si	15.70895	17.23887	10.37767
Si	15.72517	4.47249	1.27267

Si	11.72917	8.51396	12.81916
Si	22.80860	14.95317	3.79869
Si	22.80024	11.39276	1.28781
Si	11.66844	4.94422	10.40095
Si	13.20956	14.04964	1.31240
Si	24.33832	7.64505	10.37180
Si	21.27411	5.84704	12.86493
Si	10.10711	12.29937	3.84356
Si	24.29009	12.28433	3.84511
Si	13.24472	5.82391	12.85980
Si	10.14587	7.59009	10.38379
Si	21.25539	14.03081	1.27661
Si	15.69949	15.46755	12.86593
Si	15.68935	2.66269	3.81605
Si	18.83093	4.36848	1.26117
Si	18.81060	17.19744	10.36497
Si	11.60134	11.45545	1.31225
Si	22.80937	4.95807	10.37257
Si	22.78366	8.53041	12.86526
Si	11.66453	14.92822	3.83864
Si	15.73016	7.24553	13.85690
Si	24.28883	9.41209	4.84083
Si	10.11646	7.60317	7.30589
Si	18.77589	15.48064	2.27881
Si	14.15329	16.36198	4.83267
Si	20.34964	9.93810	13.91644
Si	11.64659	8.53902	2.34286
Si	22.77391	4.93981	7.32606
Si	21.27414	5.85384	2.27183
Si	18.78725	17.23347	7.33103
Si	13.27381	4.08204	4.89788
Si	15.71022	12.60810	13.87050
Al	13.28218	5.92832	2.34097
O	19.17574	13.88818	12.97309
O	19.72167	3.55179	4.75148
O	15.38025	16.77024	8.85449
O	14.96820	5.84732	1.71286
O	10.42940	11.01288	4.78656
O	19.74137	6.38898	12.89155
O	14.75552	14.23560	1.79707
O	24.05091	8.15382	8.85204
O	22.22814	9.94310	1.76675
O	12.19129	5.03947	8.86997
O	21.59586	15.37755	4.79402

O	12.95998	9.57734	12.83807
O	23.96161	11.00747	4.80235
O	14.78353	6.34768	12.88219
O	10.44083	8.01570	8.84517
O	19.71683	14.25248	1.76362
O	15.37215	13.87440	12.90358
O	14.77361	3.40859	4.92685
O	19.72679	5.62559	1.80050
O	19.09507	16.70117	8.84210
O	12.12814	10.03128	1.86215
O	22.21863	4.91753	8.85516
O	21.52892	9.55613	12.83744
O	12.90896	15.31265	4.81261
O	10.42756	8.02876	1.37327
O	4.99694	2.87716	4.39213
O	6.70482	3.86621	7.15165
O	12.29700	4.95925	1.28806
O	8.55487	9.14342	4.43341
O	10.28472	1.78890	1.28514
O	6.90047	1.77156	1.29301
O	8.56172	7.12292	7.16563
O	6.72416	8.00693	1.30655
O	10.43426	3.86465	7.24313
O	12.20603	2.93328	4.39349
O	4.98976	5.04924	1.26972
O	19.03646	3.06845	2.22209
O	17.25211	15.72245	13.28834
O	17.26622	17.70694	10.50696
O	15.41601	3.25642	2.31539
O	12.24329	7.03833	13.28217
O	22.27333	14.83445	2.26104
O	23.99341	11.88894	2.28651
O	10.44388	6.00305	10.62717
O	12.19020	14.86146	2.29204
O	24.01898	6.04827	10.48372
O	22.30700	7.02913	13.30551
O	10.38945	11.99140	2.26334
O	17.26663	12.18869	13.76630
O	21.49455	5.31440	3.78610
O	17.23078	16.99055	6.94091
O	13.22870	5.36262	3.96437
O	11.06223	8.59749	3.85933
O	19.13049	8.85530	13.76531
O	15.31344	15.91160	3.79350

O	23.32487	6.41261	6.94148
O	23.34605	8.60209	3.79504
O	11.08047	6.38504	6.83774
O	19.18506	15.94066	3.77615
O	15.33778	8.81678	13.77931
O	27.77191	16.03687	3.92793
O	19.72500	16.34623	13.89482
O	32.04861	18.48332	10.79986
O	23.94990	9.00028	13.89321
O	27.85772	8.97298	13.85539
O	24.01822	16.03666	3.80841
O	32.03995	16.28909	13.89746
O	19.79321	18.42352	10.77081
O	21.66801	19.57599	13.90898
O	25.89028	7.88605	10.77890
O	30.11112	19.56456	13.87905
O	25.84071	12.73752	3.98868
O	19.76170	11.38710	13.44815
O	21.53921	4.56884	6.33645
O	14.74360	16.36088	6.34165
O	12.94422	7.62214	2.27323
O	10.37719	8.91767	6.38737
O	17.25021	7.03962	13.34451
O	17.24520	14.92408	2.28242
O	23.99319	8.88839	6.34539
O	21.55481	7.45255	2.22614
O	12.91515	4.47926	6.44011
O	19.72499	16.39168	6.31491
O	14.78666	11.37195	13.37075
O	17.24597	2.89654	4.21847
O	19.09601	15.94454	11.35561
O	15.40583	15.98283	11.35787
O	17.29951	4.86893	1.28240
O	11.12189	8.48848	11.31900
O	23.35249	13.51566	4.32120
O	21.55246	12.43184	1.30783
O	12.92838	5.30304	11.36066
O	12.88345	12.45967	1.35407
O	23.39997	8.50786	11.36376
O	21.57940	5.34202	11.35327
O	11.07753	13.50266	4.33742
H	15.93416	7.00363	1.94746
H	24.38205	15.14967	12.70564
H	14.11085	9.02612	0.98164

H	23.46357	16.13363	13.99231
H	23.75685	13.04400	13.88203
H	16.86405	9.86760	1.53398
H	16.74345	7.45499	3.31249
H	15.51786	9.48650	2.74618
H	17.72633	7.54155	1.75240
C	14.80948	9.03123	0.14481
C	23.78437	15.15840	13.61916
C	16.79965	7.80638	2.26667
C	16.33765	9.12138	2.12328