

## Supporting Information

### A Combined Density Functional Theory and Monte Carlo Analysis of Monomolecular Cracking of Light Alkanes Over H-ZSM-5

Diana C. Tranca<sup>1</sup>, Niels Hansen<sup>1</sup>, Joseph A. Swisher<sup>2</sup>, Berend Smit<sup>2</sup>, Frerich J. Keil<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemical Engineering, Hamburg University of Technology, D-21073 Hamburg, Germany. <sup>2</sup>Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of California, Berkeley, CA 94720-1462, USA.

\*To whom correspondence should be addressed.

E-mail: keil@tu-harburg.de

(Date: October 11, 2012)

Reactant C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>

Si	8.64122	1.17564	2.00415
Si	1.63088	18.95725	8.73800
Si	11.71816	11.20231	11.51011
Si	18.72794	8.94264	4.74024
Si	11.70688	18.97553	11.52717
Si	18.72158	1.15102	4.78944
Si	8.63491	8.96344	1.98427
Si	1.64424	11.18458	8.71459
Si	6.22231	0.60584	3.94745
Si	4.04611	19.51698	10.68764
Si	14.10204	10.55385	9.58331
Si	16.30768	9.57894	2.81088
Si	14.14835	19.56608	9.61678
Si	16.26178	0.57947	2.84255
Si	6.22583	9.51816	3.93869
Si	4.05503	10.63626	10.67044
Si	5.78155	1.35108	6.92711
Si	4.48674	18.78382	0.19059
Si	14.60269	11.26570	6.61838
Si	15.86661	8.86770	13.30348
Si	14.59052	18.91594	6.63326
Si	15.87148	1.35819	13.34907
Si	5.76179	8.77110	6.91175
Si	4.47916	11.35485	0.15796
Si	2.57005	1.38347	6.93901
Si	7.69578	18.75983	0.19698
Si	17.78288	11.34365	6.55862
Si	12.66035	8.77072	13.29809
Si	17.79324	18.76581	6.60993
Si	12.66431	1.36745	13.34922
Si	2.54835	8.72365	6.91148
Si	7.68684	11.39740	0.15145
Si	1.52575	0.62818	4.10357
Si	8.74624	19.51945	10.84158
Si	18.86707	10.69799	9.38266
Si	11.59259	9.47786	2.64167
Si	18.82404	19.50041	9.44513
Si	11.60333	0.63855	2.71210
Si	1.51690	9.47381	4.07545
Si	8.78828	10.63656	10.80833
Si	3.70200	1.13957	2.05616
Si	6.57022	18.99455	8.80007
Si	16.62174	11.17413	11.36285
Si	13.79145	8.96934	4.66472
Si	16.66534	19.00002	11.50620
Si	13.77311	1.21965	4.74652
Si	3.71283	8.98281	2.04648
Si	6.57666	11.15086	8.80080
Si	8.56945	16.61121	2.24589

Si	1.67003	3.50846	8.99843
Si	11.77739	6.58066	11.24151
Si	18.63756	13.51908	4.46673
Si	11.75033	3.50889	11.30203
Si	18.67142	16.61235	4.56169
Si	8.53619	13.51156	2.21435
Si	1.66721	6.61604	8.98954
Si	6.19786	17.46946	4.14434
Si	4.06716	2.65413	10.87220
Si	14.09502	7.41229	9.35434
Si	16.34197	12.76734	2.50351
Si	14.14007	2.70747	9.39676
Si	16.26318	17.41199	2.64553
Si	6.19427	12.68008	4.14430
Si	4.06001	7.46620	10.87056
Si	5.54410	16.62923	7.10385
Si	4.73953	3.50323	0.35482
Si	14.83524	6.66252	6.38956
Si	15.58099	13.49962	13.06502
Si	14.81308	3.53681	6.44277
Si	15.58915	16.61189	13.16743
Si	5.55147	13.51434	7.10527
Si	4.73919	6.61819	0.34018
Si	2.42898	16.60072	6.97743
Si	7.85529	3.53835	0.24295
Si	17.94073	6.60766	6.52866
Si	12.46349	13.54794	13.29224
Si	17.91542	3.52370	6.55209
Si	12.48575	16.61218	13.27817
Si	2.43729	13.53818	6.96107
Si	7.85944	6.59439	0.20866
Si	1.44020	17.49598	4.12085
Si	8.83370	2.64104	10.85948
Si	18.92490	7.53615	9.37973
Si	11.43926	12.62576	2.64646
Si	18.91586	2.62920	9.41794
Si	11.47451	17.50814	2.65950
Si	1.44829	12.63254	4.11595
Si	8.86031	7.47547	10.83318
Si	3.73691	16.64553	2.30581
Si	6.53487	3.48394	9.03417
Si	16.59375	6.67897	11.19561
Si	16.61555	3.52179	11.24007
Si	13.76363	16.75443	4.53508
Si	3.73738	13.47846	2.30573
Si	6.52767	6.64690	9.03356
Al	13.82209	13.38890	4.42242
O	7.40933	1.24654	3.05151
O	2.86287	18.87913	9.78537
O	13.00675	11.27647	10.53260
O	17.46697	8.91186	3.72736
O	12.94379	18.92012	10.48095

O	17.48248	1.12529	3.74851
O	7.39739	8.87326	3.02730
O	2.91448	11.26715	9.71339
O	6.17079	1.40723	5.35609
O	4.08771	18.71219	12.09538
O	14.09963	11.32054	8.16360
O	16.29808	8.79125	1.38896
O	14.22003	18.77200	8.19831
O	16.24962	1.41729	1.45308
O	6.17386	8.71057	5.34581
O	4.03333	11.44933	12.07491
O	4.17298	1.21554	7.12863
O	6.09498	18.95325	0.37561
O	16.20892	10.96762	6.56128
O	14.25515	9.03832	13.15034
O	16.19228	18.97698	6.38932
O	14.26513	1.18454	13.14792
O	4.15119	8.90666	7.08776
O	6.08714	11.15508	0.27756
O	2.17824	1.41786	5.36731
O	8.10305	18.71763	12.10225
O	18.32111	11.51229	8.08300
O	12.22720	8.65793	1.38216
O	18.14846	18.71244	8.18818
O	12.28552	1.40909	1.45262
O	2.14357	8.67003	5.34456
O	8.14738	11.43775	12.07106
O	2.22470	1.12432	2.72750
O	8.05251	19.02292	9.46244
O	18.11516	11.21244	10.72611
O	12.30571	8.98607	4.01382
O	18.13800	18.99515	10.82578
O	12.28829	1.13543	4.09859
O	2.23302	8.98471	2.70632
O	8.07089	11.10392	9.43017
O	4.79768	0.76998	3.19553
O	5.47655	19.35049	9.94518
O	15.58830	10.64148	10.22862
O	14.85967	9.39272	3.51677
O	15.56367	19.38069	10.37542
O	14.85129	0.79979	3.60956
O	4.79520	9.37565	3.19100
O	5.51174	10.80030	9.97698
O	7.35698	16.71129	3.31094
O	2.89514	3.40560	10.05089
O	12.95449	6.56053	10.12713
O	17.57906	13.52002	3.24881
O	12.95777	3.42532	10.22834
O	17.47017	16.75841	3.48468
O	7.32246	13.45616	3.28723
O	2.89673	6.71502	10.03689
O	6.20287	16.85757	5.64062

O	4.08089	3.27270	12.36542
O	14.10958	6.93086	7.81221
O	16.42782	13.19063	0.93370
O	14.11875	3.29949	7.89029
O	16.25580	16.76288	1.16936
O	6.21184	13.29396	5.64163
O	4.04611	6.84844	12.36589
O	3.98066	17.09194	7.07313
O	6.30411	3.04423	0.32530
O	16.39559	7.12261	6.48270
O	14.02119	13.06518	13.26903
O	16.36139	3.02440	6.50583
O	14.03743	17.11620	13.22855
O	3.98888	13.05337	7.07245
O	6.30232	7.06949	0.25963
O	1.93100	16.68352	5.43655
O	8.36433	3.45995	12.17863
O	18.49563	6.71011	8.04898
O	11.86315	13.47164	1.31450
O	18.46736	3.42275	8.07400
O	11.94926	16.71163	1.33473
O	1.96354	13.46480	5.41267
O	8.39042	6.64887	12.15009
O	2.21054	16.92078	2.80771
O	8.05782	3.22414	9.55351
O	18.10628	6.96467	10.66477
O	12.18487	13.21204	3.93731
O	18.12828	3.23369	10.70767
O	12.26633	16.89653	3.95920
O	2.20509	13.20132	2.78822
O	8.05451	6.91619	9.53329
O	4.74976	17.21663	3.44920
O	5.50769	2.90486	10.15974
O	15.54988	7.13892	10.03134
O	14.93965	13.22685	3.13211
O	15.57893	3.00308	10.09268
O	14.84532	17.04043	3.38291
O	4.73198	12.91622	3.46885
O	5.50900	7.20610	10.17670
O	6.51371	19.06107	4.20219
O	3.75773	1.06187	10.94257
O	13.70865	8.98516	9.42753
O	16.59818	11.15871	2.61625
O	13.87098	1.10635	9.35154
O	16.42991	19.02094	2.55067
O	6.52842	11.09266	4.20284
O	3.75899	9.05963	10.92903
O	1.77418	19.07015	4.32252
O	8.47642	1.07213	11.06746
O	18.59242	9.10862	9.15901
O	11.83092	11.06192	2.38445
O	18.55734	1.05644	9.23696

O	11.85700	19.07525	2.51638
O	1.78509	11.05927	4.32110
O	8.54185	9.04883	11.05748
O	8.75505	2.58067	1.19565
O	1.51927	17.55286	7.92603
O	11.58693	12.62190	12.28720
O	18.82814	7.51771	5.52206
O	11.59326	17.55272	12.30252
O	18.78402	2.58160	5.55521
O	8.74080	7.56869	1.15420
O	1.51728	12.58266	7.89290
O	8.45329	19.99373	0.93741
O	1.82848	0.13593	7.67079
O	11.85988	9.99859	12.59586
O	18.60374	10.14071	5.83427
O	11.90778	0.12093	12.63061
O	18.57555	19.99879	5.89917
O	8.44648	10.19280	0.93429
O	1.80107	9.96460	7.64877
O	8.16871	17.35448	0.85661
O	2.06890	2.77883	7.59959
O	12.26177	7.37357	12.57245
O	18.04931	12.74049	5.76949
O	12.16822	2.75944	12.68398
O	18.25230	17.35792	5.94796
O	8.07639	12.82922	0.81002
O	2.06736	7.32586	7.58293
O	3.95500	2.62604	1.46567
O	6.33329	17.50417	8.21292
O	16.22036	12.67578	11.82313
O	14.09043	7.46599	5.20108
O	16.39823	17.51940	12.10057
O	14.01977	2.72248	5.28562
O	3.98950	7.49344	1.47350
O	6.33626	12.64551	8.22143
O	3.75617	0.04114	0.85791
O	6.49662	0.05335	7.59749
O	16.59902	10.15862	12.63479
O	13.84695	10.00498	5.91019
O	16.62238	0.07066	12.69878
O	13.88068	0.19836	6.01303
O	3.75572	10.06616	0.83502
O	6.46343	10.06961	7.59234
O	3.99393	17.40516	0.89265
O	6.30645	2.72384	7.61665
O	16.33346	7.49232	12.57480
O	14.25039	12.66013	5.91802
O	16.36447	2.73345	12.64140
O	13.99485	17.58869	5.89182
O	4.02321	12.72916	0.89362
O	6.27425	7.40083	7.61782
O	20.09828	0.94700	3.96347

O	10.33583	19.22157	10.70135
O	0.29736	10.97392	9.59147
O	10.01012	9.15720	2.81245
O	0.25171	19.18379	9.55839
O	10.02000	0.95394	2.82827
O	20.09449	9.15647	3.89460
O	10.36894	10.96553	10.64003
O	19.99854	17.29150	3.91150
O	10.43403	2.81723	10.63753
O	0.35871	7.32541	9.65172
O	9.82001	12.74315	2.83585
O	0.35611	2.80724	9.65976
O	9.88553	17.31789	2.90723
O	20.00805	12.82556	3.93579
O	10.45285	7.26581	10.58869
O	8.88989	15.06531	1.90543
O	1.35312	5.05969	8.67003
O	11.44458	5.05325	11.67517
O	18.93335	15.05626	4.91324
O	3.97849	15.06370	2.06847
O	6.28349	5.06350	8.79280
O	16.40830	5.10073	11.52466
O	13.94363	15.16119	5.09381
O	5.67968	15.07365	7.52981
O	4.60805	5.06154	0.77250
O	14.73886	5.09031	6.02339
O	15.67782	15.07568	12.67770
O	2.28107	15.06777	7.48660
O	8.00309	5.07038	0.75659
O	18.04449	5.05859	6.04678
O	12.35521	15.08461	12.76216
H	12.91661	14.93531	9.36497
H	13.45503	15.85977	7.96392
H	12.93286	14.13811	7.79203
H	13.92855	15.09672	6.07736
H	11.12306	15.72138	6.96926
H	11.13145	16.54061	8.52791
H	9.22602	14.91409	8.39329
H	10.36674	14.41147	9.65905
H	10.36158	13.58068	8.08909
C	10.25290	14.56334	8.57411
C	11.28635	15.55930	8.04905
C	12.72476	15.09914	8.29262

Reactant C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>

Si	8.68789	1.16350	2.01327
Si	1.67819	18.94990	8.74727
Si	11.76410	11.17814	11.53735
Si	18.77268	8.93160	4.76326
Si	11.75156	18.96042	11.52462

Si	18.77172	1.15787	4.79112
Si	8.68300	8.94811	2.00872
Si	1.68896	11.17966	8.74047
Si	6.26966	0.59720	3.96194
Si	4.09244	19.50704	10.69906
Si	14.15141	10.54498	9.59663
Si	16.36371	9.55323	2.83165
Si	14.19395	19.56245	9.61134
Si	16.32700	0.58677	2.84240
Si	6.27388	9.50588	3.95960
Si	4.09793	10.62471	10.69312
Si	5.82682	1.34912	6.93589
Si	4.53698	18.76509	0.19973
Si	14.64960	11.30285	6.64767
Si	15.90495	8.84103	13.32717
Si	14.63779	18.89167	6.63515
Si	15.91327	1.34020	13.34798
Si	5.80782	8.76705	6.93551
Si	4.52408	11.33679	0.18322
Si	2.61425	1.37538	6.94392
Si	7.74737	18.74662	0.20383
Si	17.83117	11.34397	6.58383
Si	12.69953	8.74498	13.32437
Si	17.84140	18.76252	6.60746
Si	12.70790	1.34625	13.34756
Si	2.59404	8.72100	6.93531
Si	7.73067	11.38153	0.17753
Si	1.57084	0.62033	4.10596
Si	8.79025	19.50678	10.84449
Si	18.91560	10.68011	9.40947
Si	11.63903	9.46856	2.66513
Si	18.87261	19.49471	9.44741
Si	11.65088	0.62702	2.71532
Si	1.55957	9.46291	4.09589
Si	8.83222	10.62926	10.82991
Si	3.75436	1.12545	2.06415
Si	6.61081	18.98742	8.80473
Si	16.66568	11.15067	11.38972
Si	13.84240	8.99512	4.69641
Si	16.70761	18.98925	11.50265
Si	13.83034	1.19649	4.74134
Si	3.75881	8.96550	2.07210
Si	6.61844	11.14512	8.82701
Si	8.62140	16.60305	2.25733
Si	1.71783	3.49749	9.00623
Si	11.82188	6.56890	11.26336
Si	18.68130	13.51039	4.48794
Si	11.80237	3.49306	11.29661
Si	18.71451	16.60407	4.56169
Si	8.57613	13.50332	2.23522
Si	1.71867	6.60341	9.01007
Si	6.24307	17.46225	4.15429



Si	4.11456	2.64209	10.88292
Si	14.14970	7.40307	9.36855
Si	16.39411	12.72342	2.51975
Si	14.18864	2.70281	9.38294
Si	16.33004	17.43260	2.63835
Si	6.23935	12.66882	4.16561
Si	4.10598	7.45548	10.89161
Si	5.58092	16.61849	7.10770
Si	4.78945	3.49199	0.36110
Si	14.88657	6.65040	6.40771
Si	15.63623	13.48471	13.08995
Si	14.86903	3.53403	6.43343
Si	15.64095	16.60282	13.16850
Si	5.58721	13.50298	7.12442
Si	4.78701	6.60704	0.36115
Si	2.46487	16.59229	6.98294
Si	7.90649	3.52693	0.25019
Si	17.99625	6.59814	6.55654
Si	12.51617	13.53264	13.31763
Si	17.97558	3.52221	6.56427
Si	12.53361	16.59625	13.27850
Si	2.47211	13.52895	6.97771
Si	7.90665	6.58452	0.22602
Si	1.47815	17.48704	4.12415
Si	8.88512	2.62874	10.86554
Si	18.97647	7.51884	9.40720
Si	11.48044	12.61521	2.66522
Si	18.96554	2.62249	9.42959
Si	11.52663	17.49406	2.66537
Si	1.48502	12.62237	4.12921
Si	8.90653	7.46691	10.84903
Si	3.78321	16.63405	2.31602
Si	6.58068	3.47537	9.04872
Si	16.64155	6.66728	11.21526
Si	16.65607	3.50917	11.23696
Si	13.83391	16.75769	4.51718
Si	3.78351	13.46688	2.32771
Si	6.57196	6.63835	9.05548
Al	13.86609	13.35904	4.42655
O	7.45738	1.23072	3.06212
O	2.90910	18.87073	9.79562
O	13.05276	11.24150	10.56033
O	17.51231	8.86879	3.74989
O	12.98970	18.92435	10.48014
O	17.52870	1.16729	3.75340
O	7.44437	8.85539	3.05045
O	2.96174	11.26440	9.73619
O	6.21912	1.40791	5.36550
O	4.13859	18.69775	12.10410
O	14.15133	11.34492	8.19430
O	16.32642	8.75726	1.41512
O	14.26468	18.75661	8.19958

O	16.29531	1.41943	1.45038
O	6.22427	8.70581	5.37092
O	4.07597	11.43166	12.10093
O	4.21768	1.21513	7.13376
O	6.14556	18.92581	0.38830
O	16.25260	10.98802	6.58405
O	14.29402	9.00848	13.16342
O	16.23947	18.97157	6.39620
O	14.30811	1.15031	13.15287
O	4.19702	8.90781	7.10671
O	6.13168	11.13237	0.30092
O	2.22263	1.40667	5.37210
O	8.14808	18.70743	12.10743
O	18.36931	11.49398	8.10979
O	12.27853	8.64240	1.41227
O	18.20547	18.71104	8.18347
O	12.32374	1.39453	1.44922
O	2.18422	8.66595	5.36992
O	8.19348	11.42346	12.09804
O	2.27518	1.11258	2.73142
O	8.09330	19.01111	9.46661
O	18.16024	11.18519	10.75458
O	12.35887	8.99434	4.03974
O	18.18054	18.98372	10.82279
O	12.34472	1.13475	4.09302
O	2.27872	8.96572	2.73142
O	8.11343	11.10641	9.45551
O	4.84559	0.75843	3.20829
O	5.52101	19.34607	9.95263
O	15.63410	10.62151	10.25216
O	14.91654	9.40822	3.54946
O	15.60886	19.38448	10.37377
O	14.90763	0.76531	3.60600
O	4.84125	9.35955	3.21617
O	5.55699	10.78595	10.00392
O	7.40343	16.71433	3.31425
O	2.94772	3.39105	10.05235
O	13.00863	6.57127	10.16036
O	17.59680	13.50411	3.29294
O	13.00613	3.41753	10.21773
O	17.50413	16.73664	3.49198
O	7.36498	13.45239	3.31154
O	2.94890	6.69485	10.05743
O	6.24436	16.83632	5.64487
O	4.12383	3.26799	12.37349
O	14.16692	6.87535	7.84117
O	16.48534	13.17480	0.95783
O	14.16770	3.30225	7.87902
O	16.31800	16.78314	1.16272
O	6.25680	13.27174	5.66703
O	4.09110	6.84448	12.38948
O	4.01767	17.08148	7.06749

O	6.35420	3.03392	0.32172
O	16.44839	7.10402	6.50688
O	14.07577	13.05651	13.29845
O	16.41966	3.03162	6.51061
O	14.08669	17.09596	13.23631
O	4.02414	13.04428	7.08307
O	6.34969	7.05988	0.28032
O	1.95598	16.67557	5.44540
O	8.42610	3.44640	12.18942
O	18.54164	6.68842	8.08095
O	11.91549	13.46878	1.34152
O	18.51951	3.42113	8.08845
O	11.98911	16.70782	1.33138
O	1.98945	13.45063	5.43243
O	8.43604	6.64329	12.16736
O	2.25646	16.90844	2.81753
O	8.10506	3.21792	9.56470
O	18.15773	6.95334	10.69466
O	12.22427	13.19065	3.96345
O	18.17392	3.22294	10.71848
O	12.33054	16.87020	3.95466
O	2.24925	13.19533	2.80765
O	8.10133	6.90373	9.55011
O	4.79607	17.21454	3.45445
O	5.55788	2.88768	10.17409
O	15.60357	7.14753	10.05430
O	14.96797	13.12085	3.13508
O	15.62803	2.99637	10.07930
O	14.89183	17.11690	3.36194
O	4.77496	12.90625	3.49439
O	5.55811	7.19882	10.20268
O	6.55681	19.05366	4.22837
O	3.80214	1.05069	10.96065
O	13.76838	8.97880	9.39370
O	16.69918	11.12212	2.61580
O	13.92060	1.10138	9.33087
O	16.55173	19.03495	2.55064
O	6.57784	11.08189	4.21238
O	3.79532	9.04754	10.94187
O	1.81114	19.06120	4.32575
O	8.52473	1.06027	11.07044
O	18.64772	9.09089	9.17889
O	11.86591	11.05181	2.39322
O	18.60583	1.05086	9.24224
O	11.90742	19.06233	2.53289
O	1.82531	11.04988	4.33233
O	8.58480	9.04014	11.06823
O	8.80090	2.57112	1.20967
O	1.56215	17.54517	7.93720
O	11.64281	12.59254	12.32413
O	18.88761	7.52009	5.56556
O	11.64957	17.53265	12.29188

O	18.84951	2.57723	5.57535
O	8.78868	7.55563	1.17448
O	1.55716	12.57768	7.91928
O	8.49759	19.98688	0.94125
O	1.87796	0.12550	7.67706
O	11.89558	9.96760	12.61714
O	18.63537	10.14155	5.84192
O	11.94305	0.10172	12.63485
O	18.61575	19.99319	5.88576
O	8.49484	10.18106	0.96261
O	1.84571	9.96087	7.67323
O	8.23592	17.34701	0.86411
O	2.10661	2.76854	7.60428
O	12.29132	7.34440	12.61020
O	18.11579	12.74545	5.80895
O	12.22746	2.73990	12.67441
O	18.29720	17.35263	5.94700
O	8.11204	12.81599	0.83472
O	2.11802	7.32264	7.60841
O	4.01006	2.61048	1.47184
O	6.36518	17.49999	8.21458
O	16.26921	12.65423	11.84896
O	14.14248	7.49922	5.25169
O	16.43345	17.50363	12.08284
O	14.09288	2.69591	5.28220
O	4.03771	7.47632	1.49951
O	6.36483	12.63871	8.24975
O	3.81172	0.02468	0.86849
O	6.53920	0.04954	7.60507
O	16.63666	10.13506	12.66228
O	13.88266	10.05889	5.91962
O	16.66942	0.05124	12.70467
O	13.91729	0.16117	5.99867
O	3.79950	10.04911	0.86078
O	6.51168	10.06349	7.61801
O	4.03656	17.38734	0.89869
O	6.35155	2.72054	7.62845
O	16.37997	7.46696	12.60185
O	14.31445	12.71182	5.95918
O	16.39349	2.71463	12.63171
O	14.06653	17.54511	5.90321
O	4.07102	12.71216	0.91877
O	6.31426	7.39460	7.64175
O	20.14507	0.94747	3.96095
O	10.37844	19.20324	10.70154
O	0.34437	10.96437	9.62034
O	10.05843	9.13825	2.83834
O	0.30000	19.18033	9.56823
O	10.06701	0.93818	2.83632
O	20.13692	9.14692	3.91459
O	10.41353	10.95653	10.66482
O	20.03689	17.28449	3.90346

O	10.48508	2.79999	10.63574
O	0.41015	7.30720	9.67809
O	9.86197	12.73607	2.85358
O	0.40544	2.79953	9.67468
O	9.94008	17.29968	2.92591
O	20.04449	12.81450	3.93954
O	10.49989	7.25726	10.60783
O	8.93138	15.05477	1.91918
O	1.40398	5.04961	8.67944
O	11.49253	5.03503	11.67489
O	18.98267	15.05062	4.91868
O	4.02786	15.05124	2.08706
O	6.32380	5.05539	8.81486
O	16.44691	5.08679	11.52619
O	14.06810	15.15216	5.02268
O	5.71355	15.06453	7.54212
O	4.65807	5.04829	0.78619
O	14.78228	5.08605	5.99966
O	15.74028	15.06018	12.70124
O	2.31760	15.06083	7.49629
O	8.05105	5.05820	0.76673
O	18.11166	5.05571	6.05794
O	12.40350	15.06460	12.77619
H	11.65454	14.84357	9.83102
H	10.88099	13.59928	8.84897
H	12.03751	15.38169	7.51457
H	10.94529	16.59750	8.17679
H	10.21560	15.87832	5.88237
H	8.98159	15.43556	7.07508
H	10.08246	14.19517	6.43423
H	8.62452	14.65320	9.26645
H	9.40461	15.97080	10.16777
H	9.44638	14.31297	10.80035
H	14.28168	15.07623	5.97631
C	10.01831	15.24540	6.76046
C	11.00881	15.53250	7.88945
C	10.81528	14.66313	9.13858
C	9.50065	14.91183	9.87914

Reactant C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>

Si	8.62465	1.16416	2.03426
Si	1.61726	18.94117	8.76269
Si	11.70086	11.19248	11.51224
Si	18.71001	8.91674	4.74543
Si	11.69525	18.96869	11.54066
Si	18.71022	1.14850	4.80861
Si	8.61597	8.95072	2.00470
Si	1.62426	11.17276	8.73750
Si	6.20805	0.58938	3.98619
Si	4.02988	19.50096	10.71234

Si	14.08157	10.53974	9.57128
Si	16.30459	9.55200	2.81246
Si	14.13793	19.56495	9.62503
Si	16.26524	0.58693	2.85525
Si	6.20921	9.50367	3.96055
Si	4.02813	10.61757	10.69882
Si	5.76803	1.33880	6.95961
Si	4.47677	18.76910	0.21712
Si	14.59385	11.26496	6.61577
Si	15.84108	8.85887	13.30586
Si	14.58364	18.88064	6.64841
Si	15.85108	1.35114	13.36558
Si	5.73914	8.75572	6.93193
Si	4.46089	11.34102	0.18108
Si	2.55462	1.36795	6.96221
Si	7.68895	18.75073	0.21927
Si	17.77101	11.32469	6.56416
Si	12.63481	8.76191	13.30466
Si	17.78692	18.75005	6.62491
Si	12.64421	1.35700	13.36695
Si	2.52468	8.71440	6.92856
Si	7.66829	11.38706	0.17501
Si	1.50811	0.61938	4.12251
Si	8.73397	19.49841	10.85569
Si	18.85126	10.68250	9.39391
Si	11.57132	9.46212	2.65464
Si	18.81432	19.49559	9.46432
Si	11.58720	0.62226	2.73398
Si	1.49231	9.45678	4.08793
Si	8.76755	10.63364	10.82664
Si	3.69639	1.12616	2.08878
Si	6.54945	18.97151	8.82491
Si	16.59342	11.16500	11.36059
Si	13.78557	8.96341	4.66327
Si	16.64845	18.99838	11.51980
Si	13.76941	1.18788	4.75603
Si	3.69847	8.96655	2.06862
Si	6.54299	11.13122	8.82960
Si	8.56012	16.60181	2.27594
Si	1.65889	3.49658	9.02335
Si	11.76049	6.57074	11.24513
Si	18.61044	13.50376	4.47032
Si	11.74240	3.49641	11.31625
Si	18.65252	16.59652	4.57936
Si	8.51416	13.50144	2.24069
Si	1.65063	6.60250	9.00890
Si	6.18018	17.45340	4.17430
Si	4.05206	2.63918	10.89937
Si	14.07771	7.39521	9.34584
Si	16.33616	12.72626	2.49517
Si	14.12958	2.70211	9.39987
Si	16.26792	17.43363	2.65292

Si	6.17626	12.66588	4.17205
Si	4.03650	7.45289	10.89545
Si	5.51235	16.60842	7.12447
Si	4.72910	3.48661	0.37907
Si	14.82738	6.64232	6.38920
Si	15.57377	13.48696	13.07310
Si	14.80932	3.52451	6.45307
Si	15.58451	16.60605	13.18621
Si	5.50945	13.49275	7.12690
Si	4.72440	6.60214	0.35953
Si	2.40121	16.58852	6.99492
Si	7.84703	3.52494	0.26825
Si	17.93368	6.59040	6.54604
Si	12.45176	13.53753	13.30557
Si	17.91267	3.51331	6.58436
Si	12.47518	16.60337	13.30257
Si	2.39862	13.52312	6.97383
Si	7.84403	6.58463	0.22114
Si	1.41430	17.48473	4.13647
Si	8.82903	2.62262	10.88065
Si	18.91014	7.52138	9.39730
Si	11.41836	12.61297	2.66001
Si	18.90736	2.62355	9.44758
Si	11.46580	17.48892	2.68948
Si	1.41315	12.61690	4.12558
Si	8.84285	7.46981	10.84586
Si	3.72143	16.63258	2.33074
Si	6.52076	3.47364	9.07102
Si	16.56854	6.66748	11.19679
Si	16.59542	3.51117	11.25026
Si	13.77789	16.75013	4.53167
Si	3.72115	13.46510	2.33208
Si	6.50212	6.63777	9.05770
Al	13.81882	13.35824	4.39882
O	7.39353	1.22083	3.08262
O	2.85044	18.85786	9.80852
O	12.98267	11.25008	10.52521
O	17.44597	8.86310	3.73616
O	12.93653	18.93033	10.50008
O	17.46509	1.16041	3.77332
O	7.37723	8.85676	3.04591
O	2.89750	11.25413	9.73317
O	6.16517	1.39951	5.39036
O	4.06880	18.70349	12.12409
O	14.07789	11.31913	8.15731
O	16.28669	8.77151	1.38699
O	14.20967	18.75649	8.21413
O	16.23844	1.42647	1.46707
O	6.16155	8.69757	5.36858
O	4.00714	11.43692	12.10000
O	4.15817	1.20650	7.15069
O	6.08632	18.92849	0.39671

O	16.19718	10.94841	6.57881
O	14.22928	9.03574	13.16781
O	16.18515	18.95755	6.40862
O	14.24507	1.16273	13.17450
O	4.12813	8.89884	7.09648
O	6.06898	11.13869	0.29275
O	2.16012	1.40199	5.39103
O	8.09576	18.70534	12.12470
O	18.32013	11.49138	8.08474
O	12.19287	8.64738	1.38562
O	18.14606	18.70972	8.20234
O	12.25803	1.39200	1.46834
O	2.11214	8.65871	5.36380
O	8.13518	11.43024	12.09663
O	2.21460	1.11434	2.74997
O	8.03415	18.99016	9.48317
O	18.08853	11.20364	10.72830
O	12.29808	8.96263	4.01650
O	18.12259	18.99092	10.84230
O	12.28197	1.12868	4.11171
O	2.21761	8.96564	2.72493
O	8.03941	11.10396	9.45510
O	4.78177	0.75339	3.23695
O	5.46295	19.33028	9.97596
O	15.56530	10.62933	10.22266
O	14.84956	9.39032	3.51153
O	15.55368	19.39099	10.38610
O	14.84387	0.76564	3.61497
O	4.77649	9.36090	3.21672
O	5.48936	10.76318	10.01080
O	7.34195	16.70817	3.33343
O	2.88923	3.39794	10.07081
O	12.93538	6.55530	10.12854
O	17.53649	13.51441	3.26516
O	12.95192	3.41172	10.24481
O	17.43720	16.74541	3.51808
O	7.30450	13.44691	3.31889
O	2.88079	6.69815	10.05528
O	6.18302	16.82381	5.66386
O	4.05514	3.24658	12.39770
O	14.09001	6.89515	7.80919
O	16.43672	13.14815	0.92554
O	14.10327	3.31048	7.89931
O	16.26488	16.77554	1.18064
O	6.19341	13.27161	5.67326
O	4.02423	6.82782	12.38785
O	3.95247	17.08352	7.08170
O	6.29460	3.03236	0.33467
O	16.38706	7.09993	6.50008
O	14.01262	13.06599	13.29178
O	16.35796	3.01692	6.53891
O	14.02986	17.09704	13.26375



O	3.94861	13.03020	7.06330
O	6.28603	7.05671	0.27028
O	1.89422	16.67473	5.45739
O	8.37492	3.42932	12.21208
O	18.48680	6.69383	8.06628
O	11.83752	13.44946	1.32128
O	18.46144	3.42618	8.10808
O	11.93019	16.70151	1.35596
O	1.90289	13.44830	5.43255
O	8.37624	6.64108	12.16295
O	2.19426	16.90830	2.82981
O	8.04667	3.22427	9.58671
O	18.08562	6.95187	10.67904
O	12.17144	13.20810	3.94408
O	18.11467	3.22095	10.73753
O	12.27007	16.86730	3.97942
O	2.18742	13.18935	2.80991
O	8.03062	6.91493	9.54809
O	4.73355	17.20522	3.47394
O	5.49962	2.89222	10.20133
O	15.53271	7.12451	10.02413
O	14.90795	13.14422	3.09253
O	15.57204	2.98901	10.09251
O	14.82649	17.11984	3.37142
O	4.71321	12.90420	3.49819
O	5.48801	7.20501	10.20158
O	6.49209	19.04499	4.25137
O	3.73841	1.04712	10.95607
O	13.69792	8.97060	9.39931
O	16.63370	11.12552	2.62219
O	13.86077	1.10150	9.33708
O	16.48643	19.03603	2.55558
O	6.51252	11.07859	4.22121
O	3.72094	9.04356	10.96218
O	1.74467	19.05928	4.33807
O	8.46465	1.05310	11.06876
O	18.57666	9.09299	9.17335
O	11.80809	11.04757	2.40647
O	18.55034	1.05183	9.25431
O	11.84381	19.05765	2.55106
O	1.75130	11.04409	4.33156
O	8.53026	9.04401	11.07357
O	8.73576	2.57887	1.24285
O	1.49641	17.53634	7.95278
O	11.58881	12.61378	12.28756
O	18.82136	7.50104	5.54109
O	11.59408	17.54850	12.32204
O	18.78664	2.56285	5.60134
O	8.72263	7.56014	1.16797
O	1.48889	12.57304	7.92130
O	8.43506	19.99620	0.95206
O	1.81888	0.11632	7.69245

O	11.83473	9.98768	12.59786
O	18.58357	10.12377	5.82885
O	11.88036	0.11944	12.64166
O	18.56139	19.97642	5.89580
O	8.42950	10.18511	0.96030
O	1.78068	9.95650	7.66724
O	8.17585	17.35409	0.88698
O	2.04964	2.76032	7.62591
O	12.24599	7.36376	12.57577
O	18.03248	12.72329	5.77664
O	12.16207	2.75543	12.70309
O	18.24791	17.33725	5.97322
O	8.04863	12.81944	0.83788
O	2.04783	7.31712	7.60403
O	3.95855	2.61225	1.50179
O	6.30110	17.48430	8.23361
O	16.18816	12.66811	11.81457
O	14.09584	7.46478	5.20590
O	16.37298	17.51567	12.10549
O	14.03126	2.68356	5.30594
O	3.97934	7.47817	1.49526
O	6.27246	12.62205	8.25592
O	3.75608	0.02870	0.89031
O	6.47684	0.03646	7.62782
O	16.56851	10.15145	12.63449
O	13.83190	10.01324	5.89767
O	16.60629	0.06427	12.71767
O	13.86175	0.14631	6.00705
O	3.74032	10.05132	0.85868
O	6.44277	10.04878	7.62097
O	3.97974	17.39101	0.91729
O	6.29209	2.70832	7.65623
O	16.29717	7.48411	12.57100
O	14.27183	12.66474	5.90698
O	16.32938	2.72684	12.65015
O	14.01099	17.53149	5.92190
O	4.01012	12.71474	0.92104
O	6.23998	7.38068	7.63752
O	20.08303	0.94844	3.97497
O	10.32286	19.20009	10.71307
O	0.28002	10.95613	9.61742
O	9.99010	9.14044	2.83625
O	0.24102	19.17698	9.58547
O	10.00331	0.93310	2.85632
O	20.07275	9.13213	3.89448
O	10.34556	10.97027	10.64756
O	19.97387	17.27581	3.91720
O	10.42942	2.79585	10.65341
O	0.34273	7.30967	9.67517
O	9.80046	12.73248	2.85667
O	0.34708	2.80039	9.69501
O	9.87926	17.29281	2.94847

O	19.97448	12.80894	3.92282
O	10.43389	7.25496	10.59540
O	8.86761	15.05458	1.92975
O	1.34034	5.04592	8.68672
O	11.43146	5.04239	11.67873
O	18.91304	15.03824	4.92137
O	3.96309	15.05034	2.09513
O	6.26015	5.05195	8.82931
O	16.38203	5.09025	11.52844
O	14.02487	15.14233	5.02446
O	5.62504	15.05224	7.55487
O	4.59748	5.04577	0.79369
O	14.73107	5.07219	6.00639
O	15.68475	15.06715	12.70787
O	2.25658	15.05386	7.49943
O	7.98963	5.06131	0.76937
O	18.04282	5.04248	6.06340
O	12.33808	15.07694	12.78567
H	14.16763	15.06098	5.99282
H	11.99938	13.79935	8.76343
H	12.67851	14.56538	7.35202
H	11.91979	16.84127	8.34756
H	11.00883	15.91215	9.53834
H	9.60446	16.64214	7.61237
H	10.65936	15.79233	6.48411
H	14.21932	15.94227	8.85407
H	14.43891	14.19233	9.11724
H	13.50219	15.16014	10.27185
H	10.00091	13.57722	7.52541
H	8.59301	14.46925	6.93276
H	8.95376	14.43843	8.67346
C	13.72218	15.02253	9.20258
C	12.44090	14.74754	8.41753
C	11.40984	15.87571	8.50918
C	10.25241	15.75511	7.51107
C	9.40743	14.49198	7.67131

Reactant C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>

Si	8.53652	1.13443	1.95256
Si	1.53097	18.91816	8.68580
Si	11.62089	11.16426	11.45220
Si	18.62833	8.89963	4.68941
Si	11.60756	18.92841	11.45663
Si	18.61960	1.12898	4.72625
Si	8.53308	8.92352	1.93682
Si	1.54329	11.14777	8.67131
Si	6.12152	0.56694	3.90264
Si	3.94182	19.47713	10.64097
Si	14.00280	10.51744	9.51740
Si	16.20208	9.53524	2.76738

Si	14.04317	19.53308	9.54459
Si	16.17019	0.55255	2.77805
Si	6.12587	9.47721	3.89405
Si	3.95196	10.59780	10.62991
Si	5.67601	1.31538	6.87699
Si	4.38992	18.74034	0.14095
Si	14.50947	11.20984	6.55221
Si	15.76504	8.82334	13.25668
Si	14.48814	18.90626	6.55517
Si	15.76550	1.30678	13.28133
Si	5.66095	8.73016	6.86631
Si	4.38098	11.31883	0.11645
Si	2.46147	1.34672	6.88314
Si	7.60184	18.71641	0.14169
Si	17.68542	11.29587	6.50751
Si	12.55691	8.73387	13.25149
Si	17.69248	18.74063	6.54508
Si	12.55749	1.31672	13.28505
Si	2.44517	8.68731	6.86300
Si	7.59088	11.36147	0.10582
Si	1.41492	0.59285	4.04499
Si	8.64979	19.47552	10.78266
Si	18.76505	10.65606	9.33669
Si	11.48884	9.44091	2.60665
Si	18.72574	19.46266	9.38770
Si	11.49629	0.60290	2.66102
Si	1.41036	9.43240	4.02356
Si	8.68739	10.60262	10.75934
Si	3.60635	1.09839	2.01033
Si	6.46105	18.95501	8.75131
Si	16.51571	11.13092	11.31186
Si	13.68805	8.91253	4.61708
Si	16.55514	18.95283	11.42948
Si	13.68099	1.20348	4.66621
Si	3.61471	8.94062	2.00331
Si	6.46992	11.11273	8.75796
Si	8.46824	16.57407	2.19999
Si	1.57133	3.47048	8.94989
Si	11.67605	6.54438	11.19871
Si	18.52668	13.47989	4.42139
Si	11.65629	3.47257	11.23998
Si	18.55956	16.57129	4.50576
Si	8.43546	13.47401	2.17428
Si	1.56826	6.57815	8.94396
Si	6.09374	17.43166	4.09722
Si	3.96637	2.61340	10.82578
Si	13.99664	7.37610	9.30472
Si	16.23488	12.72430	2.45276
Si	14.03475	2.67531	9.32682
Si	16.17235	17.38774	2.57819
Si	6.08853	12.64026	4.09773
Si	3.96047	7.42816	10.82591

Si	5.43769	16.58915	7.05114
Si	4.64073	3.46249	0.30488
Si	14.74550	6.62170	6.34733
Si	15.47962	13.45462	13.02321
Si	14.72843	3.49419	6.37969
Si	15.48709	16.57444	13.10952
Si	5.44361	13.47399	7.05617
Si	4.63956	6.57723	0.29398
Si	2.32310	16.56275	6.92075
Si	7.75833	3.49779	0.18833
Si	17.84276	6.57226	6.48643
Si	12.35996	13.50391	13.25164
Si	17.82307	3.48632	6.50515
Si	12.37906	16.57387	13.22854
Si	2.33041	13.49857	6.91163
Si	7.75995	6.55542	0.16050
Si	1.32682	17.45792	4.06579
Si	8.74053	2.59903	10.80522
Si	18.82743	7.49355	9.33830
Si	11.33378	12.59497	2.61692
Si	18.82141	2.59318	9.37091
Si	11.36649	17.46912	2.61668
Si	1.33603	12.59320	4.06619
Si	8.76018	7.44011	10.78418
Si	3.63355	16.60891	2.26130
Si	6.43307	3.44300	8.99123
Si	16.49157	6.63880	11.14864
Si	16.50598	3.48334	11.17246
Si	13.67524	16.72272	4.45404
Si	3.63145	13.44056	2.26433
Si	6.42627	6.60780	8.98973
Al	13.72650	13.36956	4.36123
O	7.30156	1.20502	2.99603
O	2.76263	18.83937	9.73340
O	12.90358	11.23771	10.46529
O	17.36014	8.86761	3.68543
O	12.84946	18.87795	10.41600
O	17.37103	1.12445	3.69544
O	7.29340	8.83350	2.97696
O	2.81195	11.22965	9.67256
O	6.07937	1.37282	5.30922
O	3.97934	18.67132	12.04838
O	14.00968	11.29023	8.09960
O	16.19927	8.75453	1.34147
O	14.10166	18.75437	8.11660
O	16.16447	1.37586	1.37984
O	6.08388	8.67255	5.30310
O	3.93050	11.41058	12.03451
O	4.06566	1.18374	7.06350
O	5.99969	18.90286	0.31519
O	16.11503	10.90406	6.50398
O	14.15338	8.99063	13.10411

O	16.09246	18.96166	6.33136
O	14.15870	1.12159	13.10175
O	4.04934	8.86573	7.03140
O	5.99007	11.12726	0.23219
O	2.06062	1.38069	5.31355
O	8.01349	18.67498	12.04803
O	18.21859	11.46464	8.03370
O	12.12147	8.63891	1.33503
O	18.05585	18.68657	8.12102
O	12.16195	1.35742	1.38363
O	2.03355	8.63403	5.29783
O	8.05070	11.40205	12.02509
O	2.12518	1.08291	2.67264
O	7.94552	18.98335	9.40767
O	18.00986	11.17574	10.67692
O	12.20070	8.92292	3.97012
O	18.03283	18.94320	10.76007
O	12.19034	1.13192	4.03120
O	2.13276	8.94388	2.65774
O	7.96595	11.07356	9.38446
O	4.69207	0.72890	3.15909
O	5.37466	19.31255	9.90304
O	15.48530	10.60339	10.17227
O	14.75198	9.34045	3.46675
O	15.46683	19.34210	10.28791
O	14.74531	0.75952	3.52405
O	4.69171	9.32793	3.15457
O	5.40946	10.76046	9.93762
O	7.24534	16.67505	3.25265
O	2.80275	3.36749	9.99495
O	12.85757	6.53443	10.08931
O	17.46313	13.48126	3.20834
O	12.85919	3.40479	10.15884
O	17.35538	16.70591	3.43022
O	7.21090	13.41859	3.23507
O	2.80081	6.67669	9.98768
O	6.10623	16.81477	5.59157
O	3.97205	3.23128	12.31972
O	14.01081	6.87568	7.76834
O	16.34080	13.13279	0.87963
O	14.00524	3.24312	7.81101
O	16.18304	16.75782	1.09356
O	6.11282	13.25042	5.59665
O	3.94555	6.80754	12.32004
O	3.87488	17.05474	7.00657
O	6.20586	3.00654	0.26284
O	16.30069	7.09864	6.44802
O	13.91975	13.02577	13.23639
O	16.27293	2.97301	6.46708
O	13.93400	17.06995	13.19367
O	3.88158	13.01092	7.01431
O	6.20251	7.02927	0.21359

O	1.81462	16.64635	5.38324
O	8.27537	3.41652	12.12691
O	18.40419	6.66933	8.00460
O	11.74567	13.41494	1.26614
O	18.38462	3.38616	8.02310
O	11.82066	16.69501	1.27338
O	1.84710	13.42131	5.36671
O	8.28916	6.61554	12.10170
O	2.10515	16.88723	2.75539
O	7.95832	3.18138	9.50257
O	18.00615	6.91833	10.62005
O	12.08232	13.21363	3.89115
O	18.02414	3.20039	10.65331
O	12.16919	16.82268	3.89243
O	2.09741	13.16452	2.74211
O	7.95446	6.87955	9.48468
O	4.64163	17.18314	3.40770
O	5.41173	2.86168	10.12153
O	15.45134	7.11246	9.98625
O	14.82437	13.19360	3.05356
O	15.47922	2.97827	10.00946
O	14.73602	17.03166	3.28560
O	4.62244	12.87607	3.42984
O	5.41107	7.17137	10.13402
O	6.41289	19.02262	4.15996
O	3.65180	1.02200	10.89518
O	13.61037	8.94998	9.35474
O	16.48912	11.11655	2.58274
O	13.75996	1.07533	9.30470
O	16.36909	18.99447	2.50669
O	6.42538	11.05320	4.15236
O	3.65584	9.02093	10.88733
O	1.65126	19.03377	4.26925
O	8.38865	1.02915	11.01326
O	18.49178	9.06570	9.12002
O	11.73345	11.02848	2.38379
O	18.46147	1.02055	9.19268
O	11.75830	19.03689	2.50240
O	1.67040	11.01922	4.26734
O	8.44333	9.01432	11.00575
O	8.65284	2.54039	1.14622
O	1.41781	17.51385	7.87458
O	11.49632	12.58242	12.23104
O	18.73097	7.47815	5.47692
O	11.50136	17.50519	12.23102
O	18.69524	2.55299	5.50305
O	8.64131	7.52761	1.10866
O	1.41471	12.54745	7.85263
O	8.35169	19.95430	0.88347
O	1.72782	0.09651	7.61834
O	11.76530	9.95950	12.53546
O	18.51768	10.10316	5.77952

O	11.79932	0.07561	12.56007
O	18.47673	19.96752	5.82664
O	8.34563	10.15105	0.88454
O	1.70448	9.93047	7.60327
O	8.07974	17.31429	0.80512
O	1.95996	2.73982	7.54866
O	12.15044	7.33342	12.53610
O	17.94368	12.69898	5.72582
O	12.08252	2.71356	12.61429
O	18.14046	17.32774	5.88610
O	7.98880	12.78978	0.76640
O	1.96312	7.29134	7.53762
O	3.86531	2.58445	1.42144
O	6.21770	17.46532	8.16555
O	16.10673	12.63073	11.77364
O	13.99448	7.41153	5.15402
O	16.26957	17.46965	12.01093
O	13.95204	2.70617	5.19322
O	3.89015	7.45198	1.42785
O	6.22149	12.60519	8.17722
O	3.66866	0.00045	0.81253
O	6.38222	0.01446	7.54987
O	16.49359	10.11261	12.58046
O	13.74497	9.94311	5.86695
O	16.51149	0.01815	12.62687
O	13.78801	0.19705	5.94423
O	3.66545	10.02665	0.79484
O	6.35930	10.02718	7.55325
O	3.89679	17.36354	0.84651
O	6.19757	2.68612	7.57315
O	16.23461	7.44661	12.53205
O	14.17088	12.59266	5.82583
O	16.24198	2.68170	12.56313
O	13.89544	17.59261	5.78990
O	3.92031	12.69136	0.85261
O	6.16852	7.35811	7.57274
O	19.99026	0.92199	3.89040
O	10.23687	19.17090	10.63005
O	0.19493	10.93374	9.54572
O	9.90549	9.12101	2.76855
O	0.15246	19.14488	9.50727
O	9.91181	0.91065	2.78200
O	19.99015	9.10737	3.83464
O	10.26775	10.93312	10.58615
O	19.88683	17.24445	3.84971
O	10.33953	2.78070	10.57680
O	0.26113	7.28476	9.61258
O	9.71386	12.70612	2.80864
O	0.26058	2.77147	9.62111
O	9.77774	17.28363	2.87237
O	19.89629	12.79006	3.88332
O	10.35285	7.22848	10.54173



O	8.79161	15.02725	1.86598
O	1.25506	5.02208	8.62235
O	11.34772	5.01382	11.62515
O	18.81894	15.01732	4.87086
O	3.87469	15.02592	2.03007
O	6.18127	5.02353	8.75515
O	16.29681	5.05996	11.46989
O	13.90120	15.14048	5.02458
O	5.56474	15.03368	7.47982
O	4.50904	5.02021	0.72496
O	14.67261	5.05112	5.97732
O	15.58025	15.03162	12.64325
O	2.17843	15.03015	7.43207
O	7.90571	5.02968	0.70262
O	17.93609	5.02328	6.00254
O	12.24687	15.04176	12.73303
H	14.01829	15.09851	6.01034
H	13.98121	14.19105	7.59483
H	14.14006	15.98772	7.64873
H	13.40428	15.92724	10.04088
H	13.10378	14.19524	9.89238
H	11.04700	15.64135	9.66704
H	11.72578	16.38276	8.22097
H	15.88863	15.76737	9.43139
H	16.36689	14.84507	7.98962
H	15.71335	14.00620	9.41100
H	11.69343	14.11053	7.07684
H	11.03436	13.40318	8.54478
H	9.22152	13.88599	6.87569
H	8.98499	14.87403	8.33535
H	9.66468	15.60700	6.86673
C	15.61867	14.91144	8.79433
C	14.19960	15.05772	8.24544
C	13.11462	15.14078	9.32368
C	11.70428	15.44225	8.80295
C	11.06645	14.33653	7.95627
C	9.65788	14.69308	7.48240

Transition State C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>

Si	8.60022	1.19479	2.01144
Si	1.62742	18.97019	8.76911
Si	11.70987	11.18083	11.59354
Si	18.71118	8.96638	4.80842
Si	11.69576	18.94712	11.54518
Si	18.70865	1.17193	4.77592
Si	8.61906	8.95142	2.03786
Si	1.61750	11.19767	8.77325
Si	6.20005	0.61854	3.97069
Si	4.04388	19.53000	10.72267
Si	14.09341	10.55570	9.64574

Si	16.28415	9.56335	2.87338
Si	14.09443	19.55511	9.60252
Si	16.28433	0.57184	2.81325
Si	6.21165	9.52507	3.98496
Si	4.03964	10.64165	10.71000
Si	5.74817	1.35428	6.94442
Si	4.47690	18.78218	0.21683
Si	14.57397	11.31065	6.67809
Si	15.84398	8.80756	13.37987
Si	14.58124	18.95227	6.60670
Si	15.85337	1.31514	13.32602
Si	5.75194	8.79933	6.96746
Si	4.46379	11.35137	0.21241
Si	2.53596	1.37743	6.93819
Si	7.69084	18.75108	0.22064
Si	17.76012	11.36801	6.63315
Si	12.63570	8.72087	13.36493
Si	17.78650	18.80205	6.61133
Si	12.64327	1.37771	13.31982
Si	2.54321	8.75060	6.96705
Si	7.67339	11.39897	0.22143
Si	1.49291	0.63027	4.09820
Si	8.74270	19.50434	10.86201
Si	18.84100	10.67844	9.45389
Si	11.57538	9.46623	2.70144
Si	18.83878	19.48927	9.44612
Si	11.54875	0.70307	2.65460
Si	1.50542	9.48939	4.13047
Si	8.77057	10.65821	10.86953
Si	3.69246	1.14607	2.08243
Si	6.55420	19.00963	8.83245
Si	16.60780	11.13267	11.45789
Si	13.76909	8.99278	4.75395
Si	16.62446	18.96280	11.44207
Si	13.77830	1.22084	4.66101
Si	3.69426	8.98261	2.10332
Si	6.57118	11.17668	8.85094
Si	8.57848	16.62541	2.28133
Si	1.64939	3.50599	9.00390
Si	11.74507	6.58308	11.28739
Si	18.62455	13.52493	4.54507
Si	11.73971	3.51827	11.22612
Si	18.62792	16.61334	4.55052
Si	8.53457	13.52240	2.27536
Si	1.66351	6.61193	9.02298
Si	6.19346	17.48233	4.16839
Si	4.03499	2.66791	10.90817
Si	14.09419	7.42301	9.41439
Si	16.30954	12.74215	2.58177
Si	14.09219	2.69996	9.35035
Si	16.26806	17.40922	2.62026
Si	6.17940	12.68834	4.18004

Si	4.04257	7.46449	10.91191
Si	5.52206	16.64605	7.12492
Si	4.71248	3.51560	0.37068
Si	14.81001	6.64757	6.44576
Si	15.57719	13.49164	13.14312
Si	14.80723	3.50918	6.38463
Si	15.57403	16.60411	13.14666
Si	5.53141	13.52617	7.14768
Si	4.71825	6.63047	0.38470
Si	2.40306	16.60971	7.00876
Si	7.82710	3.54538	0.22070
Si	17.92511	6.60971	6.57343
Si	12.45842	13.53557	13.38678
Si	17.91788	3.53200	6.53363
Si	12.46907	16.59883	13.32405
Si	2.41924	13.54645	7.01642
Si	7.83509	6.60394	0.23589
Si	1.40784	17.49851	4.14774
Si	8.82005	2.62751	10.85476
Si	18.90948	7.51528	9.42796
Si	11.43409	12.60536	2.72893
Si	18.88976	2.61862	9.40760
Si	11.47298	17.59157	2.66180
Si	1.43577	12.64719	4.16620
Si	8.84427	7.49740	10.86412
Si	3.72253	16.64883	2.34023
Si	6.49886	3.48583	9.06146
Si	16.58702	6.66616	11.25077
Si	16.56440	3.50683	11.20692
Si	13.77899	16.73158	4.51136
Si	3.71799	13.48730	2.34281
Si	6.51252	6.65326	9.07634
Al	13.81472	13.49788	4.51321
O	7.35597	1.27036	3.04393
O	2.88238	18.90103	9.78938
O	12.98529	11.26703	10.59683
O	17.45847	8.91605	3.78700
O	12.93384	18.85672	10.49636
O	17.44629	1.17196	3.76368
O	7.37761	8.86484	3.07747
O	2.88841	11.28350	9.77338
O	6.17690	1.41549	5.38331
O	4.06824	18.71097	12.12290
O	14.10764	11.35717	8.24454
O	16.24116	8.73247	1.47412
O	14.08764	18.82199	8.15005
O	16.32029	1.38150	1.40571
O	6.16426	8.73607	5.40246
O	4.03223	11.43361	12.12548
O	4.13954	1.18395	7.10351
O	6.08799	18.92565	0.39289
O	16.18163	11.02037	6.59148

O	14.23234	8.95347	13.18873
O	16.19259	19.10601	6.51324
O	14.24153	1.12655	13.22324
O	4.14418	8.96323	7.14507
O	6.07280	11.16649	0.35417
O	2.12252	1.42260	5.37281
O	8.10101	18.70589	12.12559
O	18.26479	11.49922	8.17339
O	12.22352	8.63453	1.45601
O	18.24382	18.68808	8.16075
O	12.17047	1.52088	1.39242
O	2.14196	8.69310	5.39997
O	8.12310	11.44393	12.13746
O	2.20549	1.12630	2.72854
O	8.04512	19.01652	9.47893
O	18.10017	11.15709	10.81707
O	12.28835	9.01597	4.08668
O	18.11177	18.96210	10.79615
O	12.28480	1.14600	4.03125
O	2.21373	8.98540	2.76122
O	8.06272	11.15532	9.49401
O	4.75854	0.77143	3.24912
O	5.48576	19.37178	9.99788
O	15.56649	10.62318	10.31904
O	14.85182	9.39931	3.61494
O	15.54815	19.34375	10.28235
O	14.83287	0.77791	3.50922
O	4.77653	9.38004	3.24738
O	5.49377	10.82573	10.01329
O	7.36349	16.72649	3.34700
O	2.86485	3.39362	10.06537
O	12.95369	6.59718	10.21118
O	17.54498	13.47131	3.35241
O	12.90226	3.50116	10.09780
O	17.46692	16.69305	3.42733
O	7.31662	13.47981	3.34700
O	2.88294	6.69979	10.08486
O	6.20263	16.87893	5.67087
O	4.01226	3.29687	12.39792
O	14.11834	6.88259	7.89239
O	16.40925	13.23295	1.02792
O	14.09596	3.15920	7.80074
O	16.27829	16.82010	1.11615
O	6.18569	13.29057	5.68349
O	4.01404	6.87632	12.41853
O	3.95874	17.09799	7.07751
O	6.27410	3.05552	0.28110
O	16.37351	7.10229	6.51437
O	14.01523	13.05838	13.34082
O	16.36620	3.03810	6.45557
O	14.01877	17.09358	13.23115
O	3.97199	13.06207	7.14097

O	6.28008	7.08557	0.29208
O	1.88632	16.69699	5.47583
O	8.35819	3.46948	12.16290
O	18.45661	6.68845	8.10499
O	11.88079	13.48086	1.42024
O	18.44565	3.40659	8.06152
O	11.95365	16.71251	1.38596
O	1.96263	13.46986	5.46480
O	8.37204	6.67480	12.18086
O	2.19837	16.91012	2.85155
O	8.02360	3.18003	9.54812
O	18.10245	6.94745	10.72253
O	12.16120	13.12362	4.05745
O	18.08073	3.21776	10.68583
O	12.28135	17.15869	4.00269
O	2.18868	13.22520	2.83933
O	8.04140	6.93431	9.56425
O	4.74723	17.21753	3.47598
O	5.48088	2.93805	10.21136
O	15.54655	7.18597	10.10830
O	14.90421	13.14934	3.22078
O	15.52723	3.03331	10.03928
O	14.84040	17.06966	3.32727
O	4.72182	12.92407	3.49893
O	5.49688	7.18638	10.23469
O	6.50663	19.07467	4.21919
O	3.75331	1.07118	10.98950
O	13.69761	8.99556	9.43419
O	16.58321	11.12986	2.61280
O	13.78868	1.10559	9.45123
O	16.51334	19.01517	2.57562
O	6.52389	11.10272	4.22732
O	3.74881	9.06016	10.93764
O	1.74613	19.07460	4.32943
O	8.48490	1.05734	11.09594
O	18.58713	9.08922	9.20839
O	11.78294	11.04569	2.40063
O	18.54919	1.04133	9.23416
O	11.76299	19.15454	2.34741
O	1.78455	11.07501	4.35917
O	8.51455	9.06930	11.08506
O	8.71271	2.58197	1.17641
O	1.50756	17.55858	7.97214
O	11.58228	12.58570	12.39917
O	18.81956	7.54879	5.60187
O	11.57221	17.53527	12.34190
O	18.80330	2.60311	5.53930
O	8.71658	7.56189	1.19785
O	1.49549	12.59595	7.94940
O	8.43384	19.99075	0.96524
O	1.79604	0.13693	7.68311
O	11.84890	9.95213	12.64744

O	18.57537	10.16667	5.89743
O	11.88653	0.12142	12.61508
O	18.58101	20.02025	5.88725
O	8.43522	10.18999	0.99530
O	1.77786	9.97850	7.70679
O	8.17421	17.34966	0.88321
O	2.05895	2.77614	7.60857
O	12.19005	7.32510	12.66171
O	18.08271	12.77295	5.88265
O	12.24490	2.75236	12.56520
O	18.14293	17.39393	5.89386
O	8.07557	12.82916	0.87692
O	2.08320	7.34439	7.63407
O	3.96305	2.63298	1.50120
O	6.29989	17.52196	8.24274
O	16.22470	12.63498	11.92765
O	14.04323	7.48466	5.29538
O	16.33550	17.47817	12.01617
O	14.05852	2.73121	5.17278
O	3.97616	7.49277	1.53317
O	6.33733	12.66995	8.26063
O	3.77172	0.05448	0.88028
O	6.47629	0.07245	7.63446
O	16.57051	10.10783	12.72133
O	13.82209	10.02669	6.00034
O	16.56480	0.02675	12.63774
O	13.87647	0.21928	5.94127
O	3.74160	10.06171	0.88781
O	6.47971	10.08534	7.64924
O	3.96665	17.41501	0.92809
O	6.22408	2.73703	7.64677
O	16.34492	7.43981	12.65679
O	14.17746	12.70137	6.01191
O	16.29465	2.69020	12.58657
O	14.10764	17.60014	5.85546
O	3.98992	12.72709	0.93374
O	6.24074	7.41989	7.67096
O	20.06932	0.95031	3.92589
O	10.32648	19.17745	10.70607
O	0.26998	10.98136	9.64662
O	9.99431	9.12723	2.86988
O	0.26926	19.20514	9.62178
O	9.97064	1.01635	2.85828
O	20.08080	9.18077	3.96628
O	10.35405	10.98606	10.71781
O	19.96950	17.29699	3.92980
O	10.41505	2.80351	10.60531
O	0.34612	7.30414	9.68294
O	9.81186	12.75851	2.91452
O	0.32681	2.81621	9.65892
O	9.88911	17.33819	2.94248
O	19.99607	12.83826	3.99968

O	10.43886	7.29810	10.62495
O	8.89563	15.07331	1.95993
O	1.35444	5.06120	8.67296
O	11.39463	5.04176	11.64892
O	18.91501	15.07349	4.95369
O	3.97240	15.06900	2.09488
O	6.28591	5.07062	8.82007
O	16.37354	5.08141	11.52625
O	13.73814	15.20207	5.00202
O	5.67012	15.09061	7.55240
O	4.59428	5.07022	0.80503
O	14.69495	5.08255	6.05310
O	15.66372	15.05366	12.69898
O	2.26528	15.07985	7.52928
O	7.97144	5.07023	0.75467
O	18.05757	5.07462	6.05699
O	12.32369	15.06233	12.82680
H	11.50427	14.18592	9.17518
H	13.13198	14.81941	9.51646
H	12.93355	13.51869	8.32725
H	12.45921	15.11179	6.35964
H	13.33300	15.83757	7.30305
H	11.81119	16.40747	7.95093
H	10.76965	15.86348	5.96449
H	10.52306	14.48426	7.14322
H	11.44200	14.20832	5.66307
C	11.19568	14.97609	6.43708
C	12.34179	15.49496	7.66117
C	12.47420	14.43269	8.72396

Transition State C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>

Si	8.60197	1.19044	2.01383
Si	1.62813	18.96846	8.77061
Si	11.71540	11.15676	11.61690
Si	18.71414	8.96463	4.81404
Si	11.70393	18.94227	11.54345
Si	18.71616	1.17031	4.77767
Si	8.62298	8.93950	2.04925
Si	1.62747	11.19671	8.78612
Si	6.20309	0.61398	3.97220
Si	4.04695	19.52654	10.72219
Si	14.09253	10.55483	9.64592
Si	16.29531	9.56231	2.87602
Si	14.09889	19.55427	9.58726
Si	16.29075	0.57029	2.81859
Si	6.21508	9.51887	3.99398
Si	4.05033	10.63687	10.72011
Si	5.75030	1.35013	6.94620
Si	4.47959	18.77562	0.21583
Si	14.57777	11.32956	6.69551

Si	15.84726	8.80143	13.38241
Si	14.58843	18.94269	6.60085
Si	15.85611	1.31147	13.32827
Si	5.75875	8.79934	6.97906
Si	4.46828	11.34422	0.22528
Si	2.54013	1.37304	6.93976
Si	7.69379	18.74293	0.22567
Si	17.76392	11.36892	6.64589
Si	12.64059	8.69558	13.37904
Si	17.79160	18.80023	6.61099
Si	12.64525	1.37218	13.32079
Si	2.54967	8.75270	6.97558
Si	7.67772	11.38908	0.23624
Si	1.49998	0.62594	4.09948
Si	8.74525	19.50007	10.86731
Si	18.85523	10.67304	9.45980
Si	11.57917	9.45336	2.70408
Si	18.84028	19.48588	9.44629
Si	11.55003	0.70188	2.65164
Si	1.51160	9.48622	4.13813
Si	8.77190	10.65107	10.88255
Si	3.69711	1.13906	2.08121
Si	6.55976	19.00791	8.83262
Si	16.61011	11.12793	11.45265
Si	13.77910	9.01046	4.75984
Si	16.62157	18.96274	11.43652
Si	13.77958	1.21500	4.66588
Si	3.69793	8.97344	2.11234
Si	6.58040	11.17650	8.86184
Si	8.58221	16.61857	2.28526
Si	1.65177	3.50377	9.00104
Si	11.75022	6.57479	11.28995
Si	18.62990	13.52216	4.55279
Si	11.73923	3.50778	11.22013
Si	18.63288	16.60904	4.55228
Si	8.54563	13.51482	2.28752
Si	1.66909	6.60942	9.02884
Si	6.19611	17.47960	4.16870
Si	4.03394	2.66386	10.90989
Si	14.09913	7.41917	9.41250
Si	16.32667	12.73766	2.58209
Si	14.09924	2.69937	9.34271
Si	16.28196	17.40727	2.61391
Si	6.18640	12.68365	4.18921
Si	4.04847	7.45887	10.91889
Si	5.52559	16.64353	7.12661
Si	4.71529	3.50965	0.36978
Si	14.81727	6.64964	6.44413
Si	15.59352	13.48705	13.14524
Si	14.80869	3.51779	6.37593
Si	15.58427	16.60064	13.14438
Si	5.53713	13.52300	7.15785



Si	4.72182	6.62445	0.39034
Si	2.40706	16.60804	7.01204
Si	7.82828	3.53843	0.21727
Si	17.93343	6.60711	6.57797
Si	12.47461	13.52395	13.40297
Si	17.91883	3.53078	6.53031
Si	12.47472	16.58622	13.32125
Si	2.42486	13.54419	7.03026
Si	7.83688	6.59651	0.24332
Si	1.41317	17.49439	4.15055
Si	8.82061	2.62202	10.85277
Si	18.91549	7.51019	9.43286
Si	11.44659	12.58631	2.73299
Si	18.88798	2.61574	9.40565
Si	11.47196	17.59342	2.65172
Si	1.44289	12.64349	4.17737
Si	8.84816	7.49148	10.87281
Si	3.72534	16.64609	2.33977
Si	6.49688	3.48192	9.06226
Si	16.58940	6.66130	11.25387
Si	16.56838	3.50109	11.21084
Si	13.78881	16.73166	4.49160
Si	3.72352	13.48578	2.35138
Si	6.51853	6.64783	9.08511
Al	13.82814	13.48752	4.51050
O	7.35882	1.26932	3.04762
O	2.88395	18.89876	9.78980
O	12.98949	11.24395	10.61970
O	17.46411	8.90451	3.78947
O	12.93711	18.86866	10.48871
O	17.45463	1.17464	3.76420
O	7.38158	8.85648	3.08883
O	2.90132	11.28088	9.78245
O	6.17461	1.41198	5.38389
O	4.07553	18.70477	12.12093
O	14.08250	11.37286	8.25401
O	16.24973	8.73365	1.47543
O	14.09363	18.80217	8.14386
O	16.32121	1.37480	1.40812
O	6.16932	8.73404	5.41358
O	4.04253	11.42641	12.13696
O	4.14264	1.17249	7.11014
O	6.09061	18.91570	0.39742
O	16.18474	11.02345	6.63750
O	14.23445	8.94084	13.19926
O	16.19898	19.10924	6.51284
O	14.24420	1.12912	13.22146
O	4.15075	8.96246	7.15689
O	6.07700	11.16043	0.37414
O	2.13222	1.41800	5.37288
O	8.10370	18.70109	12.13047
O	18.29496	11.50059	8.17717

O	12.22884	8.60468	1.47010
O	18.24835	18.68409	8.16039
O	12.17523	1.52347	1.39349
O	2.14933	8.69278	5.40840
O	8.12157	11.43458	12.15034
O	2.21074	1.12035	2.72834
O	8.04860	19.01152	9.48414
O	18.10567	11.14849	10.81918
O	12.29695	9.02976	4.09447
O	18.11114	18.95974	10.79562
O	12.28861	1.13152	4.03080
O	2.21714	8.97544	2.76983
O	8.07242	11.15727	9.50568
O	4.76316	0.76139	3.24672
O	5.48757	19.37092	9.99429
O	15.57110	10.62699	10.30794
O	14.86085	9.40996	3.61650
O	15.55060	19.35448	10.27555
O	14.84125	0.77849	3.51782
O	4.78003	9.37011	3.25689
O	5.50534	10.82227	10.02541
O	7.36522	16.72115	3.34845
O	2.86230	3.38680	10.06732
O	12.95495	6.59893	10.21006
O	17.55734	13.47379	3.35350
O	12.90509	3.48803	10.09631
O	17.47401	16.68497	3.42628
O	7.32976	13.47262	3.36189
O	2.88994	6.69563	10.08923
O	6.20090	16.87290	5.66972
O	4.00985	3.29475	12.39897
O	14.12684	6.86716	7.89447
O	16.42879	13.22429	1.02713
O	14.11025	3.18869	7.80276
O	16.30532	16.83277	1.10345
O	6.18997	13.28127	5.69424
O	4.01498	6.87140	12.42574
O	3.96246	17.09708	7.08322
O	6.27563	3.04698	0.27234
O	16.38182	7.09934	6.51964
O	14.03207	13.05442	13.35104
O	16.36660	3.04147	6.43640
O	14.02609	17.07665	13.24702
O	3.97752	13.05902	7.15605
O	6.28291	7.08156	0.29616
O	1.89320	16.69228	5.47789
O	8.36389	3.46822	12.16044
O	18.46478	6.68220	8.10988
O	11.90170	13.47938	1.43816
O	18.43275	3.40263	8.06277
O	11.94174	16.70936	1.37574
O	1.96904	13.46127	5.47892

O	8.37840	6.66943	12.19038
O	2.20177	16.90529	2.85344
O	8.02131	3.17194	9.54709
O	18.10418	6.94507	10.72590
O	12.18226	13.07318	4.06677
O	18.08408	3.21350	10.68774
O	12.29336	17.17374	3.98833
O	2.19482	13.22888	2.85290
O	8.04889	6.92157	9.57351
O	4.75073	17.22037	3.47219
O	5.47899	2.93481	10.21224
O	15.54817	7.18394	10.11392
O	14.91876	13.14089	3.21770
O	15.52954	3.02087	10.04738
O	14.84906	17.05815	3.30387
O	4.73113	12.92638	3.50575
O	5.50437	7.17901	10.24583
O	6.51377	19.07110	4.22261
O	3.75527	1.06678	10.99343
O	13.70808	8.99340	9.41965
O	16.60787	11.12672	2.61821
O	13.79629	1.10310	9.41070
O	16.52332	19.01380	2.58673
O	6.52606	11.09707	4.23189
O	3.75783	9.05519	10.94418
O	1.75225	19.07031	4.33188
O	8.48521	1.05271	11.10064
O	18.59804	9.08502	9.20874
O	11.77606	11.02882	2.37361
O	18.55075	1.03770	9.23322
O	11.75463	19.15533	2.32933
O	1.79622	11.07144	4.36119
O	8.50901	9.06245	11.08833
O	8.71276	2.57286	1.17117
O	1.50905	17.55781	7.97202
O	11.59656	12.56044	12.42873
O	18.82878	7.54897	5.60983
O	11.59136	17.51955	12.32371
O	18.81131	2.60033	5.54369
O	8.71785	7.54972	1.21003
O	1.50132	12.59885	7.96915
O	8.43593	19.98050	0.97437
O	1.79417	0.13646	7.68550
O	11.84530	9.92348	12.66474
O	18.56638	10.16623	5.89909
O	11.89422	0.10674	12.62503
O	18.58845	20.01671	5.88678
O	8.44032	10.17819	1.00627
O	1.78676	9.98434	7.71166
O	8.17982	17.34072	0.88497
O	2.06596	2.77471	7.60659
O	12.20241	7.30004	12.67139

O	18.07692	12.77154	5.88672
O	12.23778	2.74072	12.56061
O	18.14439	17.39135	5.89328
O	8.08542	12.81797	0.89090
O	2.08562	7.34854	7.64301
O	3.96911	2.62637	1.50184
O	6.30635	17.52129	8.24050
O	16.23265	12.63076	11.92524
O	14.05357	7.50439	5.30580
O	16.32374	17.47577	12.00019
O	14.04698	2.72751	5.18011
O	3.98040	7.48419	1.54121
O	6.34448	12.67016	8.27299
O	3.77469	0.04920	0.87718
O	6.48656	0.07263	7.63601
O	16.56481	10.10158	12.71469
O	13.83002	10.05177	5.99960
O	16.56290	0.02051	12.63878
O	13.87770	0.21200	5.94487
O	3.74493	10.05372	0.89766
O	6.48766	10.08618	7.65920
O	3.96497	17.40956	0.92563
O	6.22060	2.73608	7.64627
O	16.34918	7.43251	12.66203
O	14.21029	12.72418	6.02140
O	16.30384	2.68630	12.59247
O	14.12736	17.59464	5.83539
O	3.99049	12.71957	0.94457
O	6.24892	7.42086	7.68307
O	20.07709	0.94837	3.92839
O	10.32924	19.17379	10.71316
O	0.28386	10.97158	9.66382
O	9.99935	9.11111	2.88053
O	0.27054	19.20179	9.62458
O	9.97362	1.02015	2.86011
O	20.08584	9.18367	3.97649
O	10.35741	10.97342	10.74230
O	19.97472	17.29400	3.93317
O	10.41486	2.79530	10.59628
O	0.35100	7.29603	9.69319
O	9.82683	12.75585	2.92441
O	0.32550	2.81614	9.64967
O	9.89179	17.33307	2.94782
O	20.00249	12.83126	4.01498
O	10.44456	7.30076	10.63821
O	8.90166	15.06599	1.96749
O	1.36265	5.06006	8.67104
O	11.39477	5.03226	11.63900
O	18.92231	15.07056	4.96014
O	3.97882	15.06627	2.09731
O	6.28698	5.06718	8.82265
O	16.37541	5.07624	11.52619

O	13.73021	15.19891	4.97238
O	5.67482	15.08892	7.55642
O	4.60100	5.06342	0.80807
O	14.69846	5.08928	6.02995
O	15.68066	15.04901	12.70332
O	2.27061	15.07952	7.53643
O	7.96916	5.06131	0.75779
O	18.06717	5.07368	6.05714
O	12.32840	15.04617	12.83088
H	12.92940	14.94899	9.50939
H	12.59427	13.56908	8.47936
H	12.46314	15.11820	6.29459
H	13.37142	15.65393	7.30091
H	11.92373	16.52509	7.78048
H	10.87793	15.93249	5.77631
H	10.42958	14.69616	7.03430
H	11.40183	14.19881	5.65062
H	10.12070	13.86581	8.81478
H	10.38896	15.46024	9.57176
H	10.89926	13.97818	10.38739
C	11.19343	15.05113	6.33893
C	12.31131	15.51721	7.59668
C	12.21037	14.55915	8.77009
C	10.82836	14.46519	9.40812

Transition State C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>

Si	8.59704	1.19722	2.01614
Si	1.62590	18.96767	8.77423
Si	11.71785	11.17835	11.59075
Si	18.71636	8.95209	4.80795
Si	11.70045	18.95386	11.56144
Si	18.70932	1.16725	4.78784
Si	8.61479	8.94795	2.04026
Si	1.61911	11.19923	8.77418
Si	6.19723	0.61971	3.97366
Si	4.04513	19.52885	10.72454
Si	14.09730	10.53907	9.64009
Si	16.29585	9.55176	2.87346
Si	14.09576	19.55197	9.60495
Si	16.28008	0.57074	2.83315
Si	6.21006	9.52576	3.98846
Si	4.03906	10.64145	10.71456
Si	5.74721	1.35292	6.95055
Si	4.47537	18.78327	0.22096
Si	14.58481	11.28630	6.66250
Si	15.84936	8.81133	13.37726
Si	14.57999	18.92705	6.61264
Si	15.85673	1.31468	13.34067
Si	5.74958	8.80169	6.97231
Si	4.46689	11.35058	0.21497

Si	2.53556	1.37405	6.94310
Si	7.68918	18.75041	0.22766
Si	17.76854	11.35613	6.62568
Si	12.63940	8.71732	13.36059
Si	17.78495	18.79560	6.61995
Si	12.64391	1.38646	13.33512
Si	2.53991	8.75176	6.96688
Si	7.67738	11.39905	0.22395
Si	1.49227	0.62942	4.10136
Si	8.74359	19.50623	10.86946
Si	18.84343	10.67913	9.45344
Si	11.57013	9.44761	2.70018
Si	18.83748	19.48503	9.45498
Si	11.54528	0.71290	2.66504
Si	1.50267	9.48384	4.12692
Si	8.77608	10.66037	10.87051
Si	3.69007	1.14701	2.08624
Si	6.55836	19.00827	8.83689
Si	16.60639	11.13439	11.45030
Si	13.77612	8.97279	4.73487
Si	16.62170	18.96266	11.44839
Si	13.77000	1.21077	4.67752
Si	3.69722	8.98115	2.10596
Si	6.56926	11.17847	8.85807
Si	8.57999	16.62730	2.28454
Si	1.65008	3.50572	9.00456
Si	11.74944	6.57761	11.27778
Si	18.62344	13.52412	4.54391
Si	11.73683	3.51603	11.23515
Si	18.62845	16.60953	4.55934
Si	8.53450	13.52278	2.27942
Si	1.66339	6.61154	9.02438
Si	6.19190	17.48359	4.16764
Si	4.03558	2.66831	10.90924
Si	14.09419	7.40618	9.40681
Si	16.31755	12.72804	2.58149
Si	14.09930	2.69635	9.36796
Si	16.26174	17.40492	2.63910
Si	6.18012	12.68912	4.18441
Si	4.04197	7.46400	10.91441
Si	5.52125	16.64835	7.12555
Si	4.71049	3.51462	0.37101
Si	14.81982	6.64073	6.43770
Si	15.58635	13.48775	13.15158
Si	14.81192	3.50376	6.39943
Si	15.58119	16.60411	13.16152
Si	5.53005	13.52597	7.14941
Si	4.71832	6.62934	0.38353
Si	2.40406	16.61152	7.00966
Si	7.82464	3.54480	0.21759
Si	17.93168	6.60356	6.57833
Si	12.45859	13.53318	13.40370

Si	17.91922	3.52459	6.54369
Si	12.46739	16.59873	13.34468
Si	2.41802	13.54591	7.01288
Si	7.83484	6.60235	0.23138
Si	1.40593	17.49762	4.14848
Si	8.81923	2.62797	10.85376
Si	18.91145	7.51371	9.43412
Si	11.42632	12.58786	2.74022
Si	18.89103	2.61530	9.41769
Si	11.47159	17.60466	2.67417
Si	1.42986	12.64380	4.16249
Si	8.84908	7.49882	10.86288
Si	3.72010	16.64890	2.34115
Si	6.49842	3.48792	9.06386
Si	16.58573	6.65833	11.24963
Si	16.57361	3.50011	11.22704
Si	13.76969	16.71697	4.51925
Si	3.71955	13.48726	2.34735
Si	6.51250	6.65474	9.08070
Al	13.82320	13.47796	4.49818
O	7.35073	1.27644	3.04687
O	2.88221	18.89927	9.79319
O	12.99182	11.25914	10.58994
O	17.45513	8.89241	3.79698
O	12.93782	18.86677	10.51308
O	17.44414	1.17445	3.77945
O	7.37128	8.86187	3.07721
O	2.89112	11.28276	9.77351
O	6.17355	1.41238	5.38847
O	4.06923	18.71314	12.12678
O	14.11359	11.31997	8.22739
O	16.26719	8.73520	1.46584
O	14.08934	18.81280	8.15743
O	16.32435	1.36769	1.41931
O	6.16640	8.74031	5.40780
O	4.02819	11.43404	12.13010
O	4.13908	1.17845	7.11218
O	6.08637	18.92657	0.40139
O	16.19200	10.99691	6.57958
O	14.23595	8.96553	13.20758
O	16.19140	19.09622	6.51668
O	14.24312	1.14342	13.23408
O	4.14132	8.96340	7.14489
O	6.07680	11.16482	0.35046
O	2.12551	1.41763	5.37680
O	8.09715	18.71072	12.13237
O	18.26979	11.49122	8.16631
O	12.20746	8.62196	1.44611
O	18.24012	18.68510	8.17056
O	12.17500	1.53316	1.40855
O	2.13897	8.69272	5.39967
O	8.13243	11.44373	12.14178

O	2.20284	1.13011	2.73197
O	8.04848	19.01237	9.48643
O	18.09926	11.16903	10.81122
O	12.29072	8.98861	4.07752
O	18.11149	18.96034	10.80675
O	12.27644	1.14619	4.04636
O	2.21509	8.98145	2.75930
O	8.06280	11.15848	9.49782
O	4.75484	0.77116	3.25409
O	5.48690	19.36611	10.00033
O	15.57127	10.61689	10.30934
O	14.85017	9.38698	3.59006
O	15.55056	19.34665	10.28590
O	14.82675	0.79414	3.51846
O	4.77283	9.38204	3.25557
O	5.49607	10.82540	10.02313
O	7.36167	16.72441	3.34776
O	2.86697	3.39387	10.06448
O	12.95009	6.57384	10.19198
O	17.53440	13.48143	3.35795
O	12.90797	3.49353	10.11696
O	17.46248	16.68577	3.44204
O	7.31591	13.48398	3.35075
O	2.88650	6.69979	10.08202
O	6.20041	16.87885	5.67016
O	4.00658	3.29461	12.40018
O	14.11796	6.88762	7.87759
O	16.43012	13.19779	1.02286
O	14.11330	3.18089	7.82675
O	16.28842	16.83620	1.12672
O	6.19537	13.28785	5.68958
O	4.00617	6.87659	12.42136
O	3.95908	17.10371	7.08064
O	6.27180	3.05533	0.27643
O	16.38139	7.09991	6.51538
O	14.02020	13.07385	13.35910
O	16.36933	3.02577	6.45703
O	14.02117	17.07612	13.24838
O	3.97150	13.05957	7.12945
O	6.27976	7.08295	0.28037
O	1.88752	16.69869	5.47713
O	8.35735	3.47235	12.16038
O	18.46100	6.68793	8.11009
O	11.88081	13.46282	1.43709
O	18.43833	3.40436	8.07493
O	11.95771	16.71837	1.40696
O	1.95179	13.46506	5.46427
O	8.37973	6.67495	12.17950
O	2.19558	16.90656	2.85243
O	8.02471	3.18256	9.54668
O	18.10160	6.94504	10.72651
O	12.15140	13.10373	4.07585



O	18.08814	3.21292	10.70041
O	12.27873	17.18142	4.01836
O	2.18961	13.22218	2.83930
O	8.04277	6.93661	9.56486
O	4.74512	17.22007	3.47582
O	5.48314	2.94199	10.21707
O	15.54618	7.16016	10.09812
O	14.89683	13.12599	3.19550
O	15.53153	3.01613	10.06877
O	14.83197	17.04875	3.33084
O	4.72114	12.92798	3.50827
O	5.49918	7.18638	10.24233
O	6.50772	19.07516	4.21733
O	3.75645	1.07084	10.98747
O	13.69728	8.97849	9.44976
O	16.60903	11.12023	2.63817
O	13.79076	1.10253	9.44337
O	16.50270	19.01127	2.61525
O	6.52652	11.10397	4.22533
O	3.74787	9.06014	10.94086
O	1.74717	19.07294	4.32648
O	8.47828	1.05898	11.09587
O	18.58963	9.08876	9.21774
O	11.77883	11.03048	2.41269
O	18.55225	1.03785	9.24326
O	11.75703	19.16545	2.35035
O	1.77505	11.07097	4.35442
O	8.52063	9.07161	11.08465
O	8.70837	2.57931	1.17267
O	1.50769	17.55628	7.97574
O	11.59949	12.57867	12.40568
O	18.83080	7.53834	5.60658
O	11.57985	17.54181	12.36027
O	18.81146	2.59630	5.55517
O	8.71149	7.56179	1.19660
O	1.49786	12.59922	7.95321
O	8.43378	19.98539	0.97808
O	1.79286	0.13535	7.68900
O	11.85114	9.94589	12.64049
O	18.58956	10.15875	5.89151
O	11.89025	0.12652	12.63358
O	18.58145	20.01287	5.89585
O	8.43796	10.19245	1.00290
O	1.77714	9.98250	7.70500
O	8.17197	17.34508	0.88420
O	2.05900	2.77490	7.60955
O	12.21407	7.32235	12.64479
O	18.08407	12.76353	5.87758
O	12.23381	2.75796	12.58119
O	18.14980	17.38705	5.90620
O	8.07703	12.83066	0.88045
O	2.07780	7.34740	7.63553

O	3.96427	2.63292	1.50434
O	6.30486	17.52203	8.24098
O	16.20841	12.63314	11.92039
O	14.06077	7.46728	5.27459
O	16.32954	17.47918	12.02362
O	14.04378	2.71576	5.20833
O	3.98533	7.49267	1.53719
O	6.32913	12.67133	8.26864
O	3.76854	0.05419	0.88471
O	6.48078	0.07481	7.64249
O	16.57422	10.10948	12.71331
O	13.82926	10.00793	5.98037
O	16.55930	0.02533	12.64534
O	13.86779	0.18640	5.93795
O	3.74699	10.06067	0.89099
O	6.47578	10.08831	7.65581
O	3.96361	17.41473	0.92907
O	6.21939	2.73870	7.64994
O	16.33396	7.44202	12.64820
O	14.19350	12.67817	5.99368
O	16.31321	2.69093	12.61242
O	14.12425	17.56587	5.86722
O	3.99780	12.72570	0.94038
O	6.23753	7.42266	7.67640
O	20.06794	0.94663	3.93364
O	10.32884	19.18427	10.72501
O	0.27192	10.98290	9.64814
O	9.98872	9.11611	2.87663
O	0.26836	19.19897	9.62829
O	9.96695	1.02822	2.86485
O	20.08043	9.16633	3.95679
O	10.35922	10.99093	10.71646
O	19.96742	17.29519	3.93348
O	10.41528	2.80022	10.60788
O	0.34789	7.30213	9.69041
O	9.80554	12.75006	2.92495
O	0.32895	2.81574	9.66126
O	9.88543	17.34908	2.94562
O	19.99089	12.83710	3.98796
O	10.44381	7.30094	10.62250
O	8.90441	15.07306	1.97120
O	1.35566	5.06101	8.67303
O	11.38769	5.04164	11.64932
O	18.92001	15.06884	4.95963
O	3.97261	15.06867	2.09777
O	6.28550	5.07285	8.82294
O	16.38004	5.07592	11.53859
O	13.70721	15.17753	4.96972
O	5.66497	15.09147	7.55112
O	4.59385	5.06971	0.80466
O	14.70864	5.07437	6.05141
O	15.69155	15.05165	12.72638

O	2.27070	15.07966	7.52553
O	7.96985	5.06965	0.75226
O	18.05969	5.06707	6.06652
O	12.29877	15.06116	12.86156
H	11.67864	14.05290	9.31680
H	12.96951	13.38917	8.29955
H	12.31149	14.91235	6.24166
H	13.19099	15.72661	7.24223
H	11.68658	16.19033	8.02278
H	10.88610	13.74445	7.13194
H	11.50069	14.14117	5.59739
H	14.60146	15.06624	9.18829
H	13.87329	14.12473	10.50166
H	13.32671	15.78715	10.20598
H	10.40983	16.48006	5.68808
H	9.56144	15.97169	7.17517
H	9.27159	15.11459	5.64228
C	13.65848	14.86011	9.71646
C	12.59783	14.31218	8.76570
C	12.26147	15.31999	7.68252
C	11.16074	14.64706	6.57695
C	10.03774	15.61457	6.25084

Transition State C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>

Si	8.56889	1.20199	2.02112
Si	1.58531	18.97274	8.76761
Si	11.66943	11.23934	11.50830
Si	18.67212	8.94149	4.73725
Si	11.66776	18.97334	11.54908
Si	18.67154	1.16895	4.79063
Si	8.57032	8.97711	1.99765
Si	1.58110	11.19776	8.73260
Si	6.16419	0.62037	3.97658
Si	3.99880	19.53360	10.71549
Si	14.02857	10.58076	9.56203
Si	16.25961	9.57851	2.80348
Si	14.07477	19.56291	9.61660
Si	16.23452	0.59279	2.82758
Si	6.16938	9.53259	3.96285
Si	3.98769	10.64528	10.68859
Si	5.71775	1.35702	6.95347
Si	4.43678	18.80149	0.21678
Si	14.55241	11.22942	6.57637
Si	15.81055	8.88451	13.29245
Si	14.55529	18.96013	6.60781
Si	15.82122	1.35899	13.34308
Si	5.70276	8.78345	6.93099
Si	4.41960	11.37713	0.17513
Si	2.50388	1.38495	6.94539
Si	7.65071	18.76888	0.22211

Si	17.72726	11.33520	6.56074
Si	12.59864	8.78096	13.28667
Si	17.76323	18.79213	6.62443
Si	12.60729	1.40415	13.33981
Si	2.49079	8.74700	6.92042
Si	7.63296	11.42679	0.17680
Si	1.45518	0.64482	4.10141
Si	8.71045	19.51074	10.86178
Si	18.81126	10.70445	9.38713
Si	11.52790	9.47590	2.64428
Si	18.79740	19.51065	9.46519
Si	11.51982	0.69283	2.68558
Si	1.45591	9.48727	4.08171
Si	8.73079	10.67852	10.82879
Si	3.65733	1.16029	2.08940
Si	6.51618	19.00523	8.83754
Si	16.55059	11.20703	11.33902
Si	13.74603	8.92437	4.63154
Si	16.59942	18.98949	11.47597
Si	13.73715	1.24516	4.68568
Si	3.66489	8.99843	2.06885
Si	6.50568	11.16305	8.82296
Si	8.53008	16.63356	2.28352
Si	1.61652	3.52176	9.00581
Si	11.71834	6.60011	11.22118
Si	18.56293	13.52813	4.47819
Si	11.70573	3.53776	11.26070
Si	18.59509	16.61339	4.57611
Si	8.49970	13.52878	2.25072
Si	1.61335	6.62725	8.99575
Si	6.14775	17.48306	4.17129
Si	4.00035	2.67303	10.90034
Si	14.03427	7.43867	9.35125
Si	16.27587	12.77227	2.51372
Si	14.07060	2.70686	9.38600
Si	16.20688	17.42703	2.65789
Si	6.13436	12.69254	4.15856
Si	3.99251	7.47598	10.89084
Si	5.47521	16.64598	7.13013
Si	4.68120	3.51980	0.36898
Si	14.78172	6.66742	6.39134
Si	15.53802	13.50502	13.08386
Si	14.76841	3.51184	6.42312
Si	15.54626	16.62785	13.18754
Si	5.46674	13.52940	7.12127
Si	4.68415	6.63503	0.35421
Si	2.35586	16.61881	7.00182
Si	7.79880	3.55413	0.23011
Si	17.88729	6.61248	6.52748
Si	12.42352	13.56104	13.33226
Si	17.87013	3.52726	6.55458
Si	12.44118	16.62795	13.34290

Si	2.35373	13.55495	6.98098
Si	7.80395	6.61495	0.20688
Si	1.36669	17.50770	4.13693
Si	8.79437	2.63718	10.85863
Si	18.86690	7.54102	9.38208
Si	11.40791	12.62734	2.69032
Si	18.86022	2.64158	9.42714
Si	11.43031	17.57412	2.69157
Si	1.37567	12.64753	4.13025
Si	8.80930	7.51394	10.83542
Si	3.68187	16.66002	2.33368
Si	6.47056	3.49266	9.06733
Si	16.52925	6.68688	11.18694
Si	16.54218	3.53398	11.22472
Si	13.72878	16.71642	4.54231
Si	3.67329	13.49567	2.31787
Si	6.46360	6.66380	9.05773
Al	13.80982	13.51960	4.44139
O	7.32454	1.27065	3.05467
O	2.84015	18.88938	9.78770
O	12.93444	11.33794	10.49634
O	17.40962	8.90297	3.72741
O	12.90156	18.87024	10.49781
O	17.40841	1.16652	3.78031
O	7.33118	8.88990	3.03900
O	2.85674	11.28297	9.72573
O	6.14133	1.41445	5.39077
O	4.01904	18.73246	12.12578
O	13.99414	11.28944	8.11283
O	16.28838	8.82327	1.36346
O	14.09273	18.84498	8.15956
O	16.27855	1.41165	1.42540
O	6.13205	8.72308	5.36961
O	3.97166	11.45781	12.09226
O	4.10781	1.19948	7.11707
O	6.04760	18.95612	0.38397
O	16.16077	10.93263	6.59368
O	14.19528	9.04432	13.18114
O	16.16849	19.06688	6.47303
O	14.20900	1.18251	13.22015
O	4.09383	8.94616	7.08960
O	6.03065	11.20698	0.29831
O	2.09399	1.42449	5.37916
O	8.06950	18.71910	12.12975
O	18.28722	11.51290	8.07704
O	12.12459	8.67241	1.35764
O	18.17645	18.71732	8.18808
O	12.15272	1.49651	1.42027
O	2.08089	8.68796	5.35529
O	8.09228	11.47393	12.09509
O	2.17036	1.14876	2.73591
O	8.00694	19.01165	9.48526

O	18.04921	11.23605	10.71708
O	12.25170	8.94780	3.99666
O	18.08493	18.98647	10.82443
O	12.24059	1.15822	4.06397
O	2.18063	8.99970	2.71595
O	8.00306	11.14946	9.45387
O	4.72399	0.77985	3.25340
O	5.44491	19.36711	10.00090
O	15.52037	10.71022	10.18451
O	14.79934	9.34256	3.46932
O	15.51889	19.34331	10.31354
O	14.78804	0.82528	3.52307
O	4.73349	9.39526	3.22584
O	5.44929	10.80453	10.00040
O	7.31463	16.72103	3.35129
O	2.83990	3.42258	10.06178
O	12.89332	6.57125	10.10525
O	17.51128	13.53328	3.25683
O	12.89345	3.49607	10.16179
O	17.40190	16.74189	3.49502
O	7.28410	13.46490	3.32489
O	2.83617	6.72064	10.05246
O	6.15026	16.88040	5.67407
O	3.98164	3.28062	12.39915
O	14.04596	7.00757	7.79499
O	16.39701	13.15286	0.93108
O	14.05245	3.18414	7.84154
O	16.24550	16.80899	1.16433
O	6.12651	13.31511	5.65478
O	3.97062	6.86738	12.38986
O	3.91229	17.10041	7.09202
O	6.24494	3.06738	0.28854
O	16.34251	7.12727	6.47946
O	13.97651	13.07209	13.28542
O	16.32144	3.01746	6.49352
O	13.99253	17.12455	13.27032
O	3.90710	13.07218	7.09175
O	6.24566	7.08718	0.24819
O	1.85869	16.71351	5.46375
O	8.33275	3.46467	12.17521
O	18.44263	6.72101	8.04733
O	11.83380	13.46965	1.35796
O	18.41120	3.42919	8.08072
O	11.90967	16.71596	1.39960
O	1.88436	13.47512	5.43324
O	8.34759	6.68597	12.15335
O	2.15572	16.92385	2.83769
O	7.99741	3.20466	9.55823
O	18.04611	6.96151	10.66198
O	12.13643	13.19625	4.00069
O	18.06120	3.24883	10.70854
O	12.21716	17.08590	4.02584

O	2.14554	13.22475	2.81309
O	7.98978	6.96519	9.54039
O	4.70168	17.22190	3.47679
O	5.45226	2.93730	10.21350
O	15.49203	7.14949	10.01594
O	14.86615	13.24448	3.10069
O	15.51464	3.03365	10.05964
O	14.77511	17.08375	3.35044
O	4.68325	12.92101	3.46214
O	5.44638	7.21567	10.20593
O	6.46537	19.07462	4.22077
O	3.70076	1.07826	10.95645
O	13.63853	9.00655	9.48395
O	16.53576	11.16389	2.66014
O	13.77123	1.11349	9.46964
O	16.43354	19.03455	2.57827
O	6.47506	11.10686	4.23327
O	3.68789	9.06964	10.94157
O	1.69658	19.08532	4.31618
O	8.45401	1.06587	11.08038
O	18.53154	9.11467	9.17369
O	11.77846	11.06170	2.41553
O	18.51527	1.06491	9.25852
O	11.74739	19.14007	2.41506
O	1.71771	11.07385	4.32717
O	8.49996	9.08935	11.06909
O	8.67902	2.59907	1.20008
O	1.45626	17.56537	7.96358
O	11.54532	12.64255	12.31611
O	18.77812	7.51771	5.51977
O	11.54863	17.57382	12.36687
O	18.75704	2.59218	5.56871
O	8.67583	7.58342	1.16740
O	1.44165	12.59980	7.91976
O	8.39798	20.00798	0.96357
O	1.76552	0.14243	7.68760
O	11.81999	10.00964	12.55840
O	18.55409	10.13986	5.83024
O	11.86145	0.15955	12.60471
O	18.55864	20.00469	5.89014
O	8.37994	10.20679	0.94691
O	1.74165	9.98595	7.65834
O	8.11730	17.36543	0.89133
O	2.02172	2.78336	7.61355
O	12.21060	7.38482	12.55426
O	17.97265	12.73330	5.77035
O	12.17141	2.79205	12.62672
O	18.17032	17.37386	5.95194
O	8.04285	12.84884	0.84457
O	2.02522	7.34751	7.59775
O	3.93427	2.64636	1.50823
O	6.25991	17.51744	8.24653

O	16.15677	12.70684	11.81175
O	14.04521	7.41820	5.16274
O	16.32316	17.51472	12.07849
O	14.00237	2.75411	5.21026
O	3.95297	7.50973	1.50041
O	6.25307	12.65154	8.23097
O	3.72744	0.06789	0.88732
O	6.43835	0.06977	7.64097
O	16.51030	10.17646	12.59524
O	13.82057	9.94416	5.88669
O	16.53608	0.07461	12.65135
O	13.86566	0.24369	5.96148
O	3.71926	10.07905	0.85596
O	6.42020	10.07027	7.62302
O	3.93787	17.42888	0.92538
O	6.20640	2.73759	7.65344
O	16.26699	7.50824	12.56039
O	14.21518	12.60498	5.85499
O	16.27657	2.73718	12.61647
O	14.03040	17.62460	5.86465
O	3.94067	12.74831	0.90084
O	6.18795	7.40493	7.63865
O	20.03278	0.97224	3.93529
O	10.29508	19.18861	10.71122
O	0.24126	10.97206	9.61504
O	9.94182	9.17442	2.83037
O	0.22814	19.21482	9.61909
O	9.93913	1.00855	2.86363
O	20.03783	9.15846	3.88900
O	10.30612	11.03242	10.64529
O	19.92953	17.28708	3.92635
O	10.39052	2.82156	10.61888
O	0.30118	7.33175	9.65451
O	9.78361	12.76107	2.87704
O	0.29951	2.83160	9.67096
O	9.83818	17.34769	2.94400
O	19.93786	12.83860	3.94517
O	10.39864	7.30368	10.57497
O	8.85242	15.08374	1.95203
O	1.30765	5.07230	8.66410
O	11.36816	5.07421	11.64601
O	18.86436	15.05932	4.94216
O	3.92694	15.07947	2.08584
O	6.24383	5.07630	8.82844
O	16.33384	5.11140	11.52041
O	13.74945	15.18820	5.04150
O	5.61737	15.08658	7.55009
O	4.55736	5.07884	0.78725
O	14.68382	5.08432	6.09451
O	15.63237	15.08433	12.71924
O	2.20334	15.08436	7.50491
O	7.94559	5.08720	0.74123



O	17.99241	5.06309	6.05048
O	12.30136	15.10142	12.81531
H	12.87057	13.82450	8.99502
H	14.00328	14.14396	7.67958
H	12.38289	14.98606	6.37195
H	12.76648	16.38955	7.27773
H	11.53806	15.84473	8.42618
H	10.50730	15.46336	6.45669
H	11.53070	14.30460	5.63260
H	14.79198	16.23296	8.82880
H	14.94177	14.82931	9.90489
H	13.61000	15.98137	10.13368
H	11.52906	12.71509	7.51782
H	10.37904	13.72862	8.40271
H	9.18067	11.92973	7.15875
H	8.72642	13.51058	6.48804
H	9.88424	12.47899	5.61756
C	14.22271	15.46950	9.37677
C	13.36437	14.62785	8.43165
C	12.32396	15.49573	7.74304
C	11.23604	14.67385	6.67049
C	10.71047	13.43738	7.39370
C	9.56053	12.80472	6.61624