



## Nanoscale

### ARTICLE

## Quantum chemical models for the absorption of endohedral clusters on Si(111)-(7x7): a subtle balance between W-Si and Si-Si bonding.

Xiao Jin,<sup>a</sup> Vaida Arcisauskaite<sup>a</sup> and John E. McGrady<sup>a\*</sup>

### Supporting information.

1. Table of coordinates (Cartesians and fractional)
2. Figure S1. Geometries of structures A and A'.
3. Figure S2. Geometries of 'hard-landed' WSi<sub>12</sub> clusters
4. Figure S3. Choice of geometry for the 2-probe calculations of transmission.

**Table 1. Optimized coordinates (Cartesian and fractional) of all structures described in the text.****WSi<sub>12</sub> (Cartesian coordinates)**

|    |           |           |           |
|----|-----------|-----------|-----------|
| W  | 0.000000  | 0.000000  | 0.000000  |
| Si | 2.065427  | -1.192475 | -1.210612 |
| Si | 2.065427  | 1.192475  | -1.210612 |
| Si | 0.000000  | 2.384950  | -1.210612 |
| Si | -2.065427 | 1.192475  | -1.210612 |
| Si | -2.065427 | -1.192475 | -1.210612 |
| Si | 0.000000  | -2.384950 | -1.210612 |
| Si | 2.065427  | -1.192475 | 1.210612  |
| Si | 2.065427  | 1.192475  | 1.210612  |
| Si | 0.000000  | 2.384950  | 1.210612  |
| Si | -2.065427 | 1.192475  | 1.210612  |
| Si | -2.065427 | -1.192475 | 1.210612  |
| Si | 0.000000  | -2.384950 | 1.210612  |

**unreconstructed Si(111) surface Si<sub>96</sub>H<sub>16</sub>**

## lattice parameters

|                    |                      |                    |
|--------------------|----------------------|--------------------|
| 7.6800499999999996 | -13.3022368046690005 | 0.0000000000000000 |
| 7.6800499999999996 | 13.3022368046690005  | 0.0000000000000000 |
| 0.0000000000000000 | 0.0000000000000000   | 18.541399999999994 |

## Fractional coordinates

## H

|                    |                     |                    |
|--------------------|---------------------|--------------------|
| 0.7484887037157771 | 0.7509686840762109  | 0.2153132241406939 |
| 0.5004142239408934 | 0.7497136416209095  | 0.2155309913171331 |
| 0.2484901248117789 | 0.7509686840762109  | 0.2153132241406939 |
| 0.2484901248117789 | 0.2509701051722055  | 0.2153132241406939 |
| 0.7500086658998650 | -0.0004261559261170 | 0.2154631632314898 |
| 0.2500100869958667 | 0.4995724229778884  | 0.2154631632314898 |
| 0.2500100869958667 | -0.0004261559261170 | 0.2154631632314898 |
| 0.7484887037157771 | 0.2509701051722055  | 0.2153132241406939 |
| 0.7500086658998650 | 0.4995724229778884  | 0.2154631632314898 |
| 0.0004156450368951 | 0.7497136416209095  | 0.2155309913171331 |
| 0.0004156450368951 | 0.2497150627169041  | 0.2155309913171331 |
| 0.4990415737763830 | 0.4997592603709389  | 0.2151019838755019 |
| 0.4990415737763830 | 0.9997606814669335  | 0.2151019838755019 |
| 0.9990429948723851 | 0.4997592603709389  | 0.2151019838755019 |
| 0.9990429948723851 | 0.9997606814669335  | 0.2151019838755019 |
| 0.5004142239408934 | 0.2497150627169041  | 0.2155309913171331 |

## Si

|                    |                     |                    |
|--------------------|---------------------|--------------------|
| 0.2497003235582148 | 0.0002088564849239  | 0.2965746051922687 |
| 0.9162954355870506 | 0.5831577795743318  | 0.3382420511868380 |
| 0.1660088649630642 | 0.3337670259366269  | 0.3386500350892429 |
| 0.1660088649630642 | 0.8337656048406252  | 0.3386500350892429 |
| 0.4157342924159162 | 0.3329128245257960  | 0.3377038384595698 |
| 0.6660074438670625 | 0.8337656048406252  | 0.3386500350892429 |
| 0.9162954355870506 | 0.0831592006703264  | 0.3382420511868380 |
| 0.4992833996567371 | -0.0003541980936861 | 0.2962224227373544 |
| 0.6660074438670625 | 0.3337670259366269  | 0.3386500350892429 |
| 0.9165195633589566 | 0.0832973633291835  | 0.4658869507207899 |
| 0.0833826567792555 | 0.9165427919868780  | 0.6365588592316622 |

-0.0007151792472612 -0.0003541980936861 0.2962224227373544  
0.4165209844549584 0.5832959422331890 0.4658869507207899  
0.5833812356832606 0.9165427919868780 0.6365588592316622  
0.3333752510577098 0.1665247906104498 0.6365600021141655  
0.8333738299617081 0.6665233695144482 0.6365600021141655  
0.0833826567792555 0.4165442130828798 0.6365588592316622  
0.4157342924159162 0.8329114034297941 0.3377038384595698  
0.5833812356832606 0.4165442130828798 0.6365588592316622  
0.1663926498755013 0.3335134579319382 0.4662235745299440  
-0.0007151792472612 0.4996443808103121 0.2962224227373544  
0.9157328713199144 0.8329114034297941 0.3377038384595698  
0.4162968566830524 0.5831577795743318 0.3382420511868380  
0.1664550196807119 0.5834092532774031 0.4653497286269739  
0.6660073779622548 0.0834841377947459 0.3376316980605644  
0.1660087990582567 0.5834827166987514 0.3376316980605644  
0.1660087990582567 0.0834841377947459 0.3376316980605644  
0.7489620276014067 0.7503274550056948 0.2964125863414109  
0.7489620276014067 0.2503288761016968 0.2964125863414109  
0.2489634486974087 0.7503274550056948 0.2964125863414109  
0.4995872256823529 0.7498193530925550 0.2966349323581418  
0.4162968566830524 0.0831592006703264 0.3382420511868380  
0.4995872256823529 0.2498207741885571 0.2966349323581418  
-0.0004113532216454 0.7498193530925550 0.2966349323581418  
-0.0004113532216454 0.2498207741885571 0.2966349323581418  
0.7496989024622129 0.5002074353889223 0.2965746051922687  
0.7496989024622129 0.0002088564849239 0.2965746051922687  
0.2497003235582148 0.5002074353889223 0.2965746051922687  
0.6660073779622548 0.5834827166987514 0.3376316980605644  
0.3330962718428723 0.4166770121964354 0.6367308364242147  
0.4992833996567371 0.4996443808103121 0.2962224227373544  
0.9157328713199144 0.3329128245257960 0.3377038384595698  
0.4165209844549584 0.0832973633291835 0.4658869507207899  
0.6664535985847099 0.5834092532774031 0.4653497286269739  
0.6664535985847099 0.0834106743733978 0.4653497286269739  
0.1664550196807119 0.0834106743733978 0.4653497286269739  
0.3330962718428723 0.9166755911004336 0.6367308364242147  
0.2498885677055630 0.5000072005050316 0.6717149223431117  
0.8330948507468702 0.9166755911004336 0.6367308364242147  
0.9162903637104597 0.3331076977036145 0.4654022386366333  
0.9162903637104597 0.8331062766076128 0.4654022386366333  
0.0832306379887844 0.1666422652478269 0.5082043367355807  
0.0832306379887844 0.6666408441518251 0.5082043367355807  
0.5832292168927895 0.1666422652478269 0.5082043367355807  
0.5832835516809761 0.1669083169976056 0.6367873371294628  
0.3329947023385401 0.1665549859071040 0.5080576323375150  
0.5832292168927895 0.6666408441518251 0.5082043367355807  
0.8329932812425381 0.1665549859071040 0.5080576323375150  
0.4162917848064616 0.8331062766076128 0.4654022386366333  
0.3332699355371197 0.9165764311947586 0.5081574245802850  
0.0832849727769706 0.1669083169976056 0.6367873371294628  
0.8329932812425381 0.6665535648111021 0.5080576323375150  
0.8332685144411176 0.4165778522907603 0.5081574245802850  
0.8332685144411176 0.9165764311947586 0.5081574245802850

0.3332699355371197 0.4165778522907603 0.5081574245802850  
 0.5828454658002289 0.9168811361322208 0.5080409425401974  
 0.5828454658002289 0.4168825572282227 0.5080409425401974  
 0.0828468868962235 0.9168811361322208 0.5080409425401974  
 0.0828468868962235 0.4168825572282227 0.5080409425401974  
 0.0832849727769706 0.6669068959016038 0.6367873371294628  
 0.4162917848064616 0.3331076977036145 0.4654022386366333  
 0.6663912287794995 0.8335120368359364 0.4662235745299440  
 0.6663912287794995 0.3335134579319382 0.4662235745299440  
 -0.0000100033228297 -0.0000061937507412 0.6706733843844879  
 -0.0000100033228297 0.4999923851532570 0.6706733843844879  
 0.4999885755811685 -0.0000061937507412 0.6706733843844879  
 0.4999885755811685 0.4999923851532570 0.6706733843844879  
 0.2498885677055630 0.0000086216010333 0.6717149223431117  
 0.2489634486974087 0.2503288761016968 0.2964125863414109  
 0.7498871466095614 0.0000086216010333 0.6717149223431117  
 0.7498871466095614 0.5000072005050316 0.6717149223431117  
 -0.0001154051315469 0.2500567847170612 0.6717560129980418  
 -0.0001154051315469 0.7500553636210596 0.6717560129980418  
 0.4998831737724513 0.2500567847170612 0.6717560129980418  
 0.4998831737724513 0.7500553636210596 0.6717560129980418  
 0.2500596504757884 0.2499305200313156 0.6711005657187137  
 0.2500596504757884 0.7499290989353139 0.6711005657187137  
 0.7500582293797867 0.2499305200313156 0.6711005657187137  
 0.7500582293797867 0.7499290989353139 0.6711005657187137  
 0.3333752510577098 0.6665233695144482 0.6365600021141655  
 0.8333738299617081 0.1665247906104498 0.6365600021141655  
 0.5832835516809761 0.6669068959016038 0.6367873371294628  
 0.3329947023385401 0.6665535648111021 0.5080576323375150  
 0.1663926498755013 0.8335120368359364 0.4662235745299440  
 0.8330948507468702 0.4166770121964354 0.6367308364242147  
 0.9165195633589566 0.5832959422331890 0.4658869507207899

## Haneman 2 by 2 reconstruction ( $\text{Si}_{96}\text{H}_{16}$ )

### Lattice parameters

7.6800499999999996 -13.3022368046690005 0.0000000000000000  
 7.6800499999999996 13.3022368046690005 0.0000000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.5413999999999994

### Fractional coordinates

#### H

0.7500513232699227 0.7501408500348962 0.2143519119239181  
 0.4987544841814797 0.2471912293709509 0.2156582359673148  
 -0.0014198792711149 0.0014381855202595 0.2156232007982954  
 -0.0014198792711149 0.5014367644242578 0.2156232007982954  
 0.4985786996328903 0.5014367644242578 0.2156232007982954  
 -0.0012440947225186 0.2471912293709509 0.2156582359673148  
 -0.0012440947225186 0.7471898082749491 0.2156582359673148  
 0.2500527443659173 0.7501408500348962 0.2143519119239181  
 0.4985786996328903 0.0014381855202595 0.2156232007982954  
 0.2529347852115225 0.0013250548426399 0.2156364520909166  
 0.2529347852115225 0.5013236337466379 0.2156364520909166

0.7529333641155208 0.0013250548426399 0.2156364520909166  
 0.7529333641155208 0.5013236337466379 0.2156364520909166  
 0.2500527443659173 0.2501422711308978 0.2143519119239181  
 0.4987544841814797 0.7471898082749491 0.2156582359673148  
 0.7500513232699227 0.2501422711308978 0.2143519119239181

Si

0.3331626354765714 0.4161628776847723 0.5094286378131496  
 0.5834296125761698 0.9167580004479648 0.5064236660808056  
 0.5834296125761698 0.4167594215439665 0.5064236660808056  
 0.0834310336721715 0.9167580004479648 0.5064236660808056  
 0.7500576528174986 0.7499900214551735 0.7050901011931916  
 0.3331230460180236 0.1669814288620355 0.5093905650045786  
 0.7500592096774977 0.2499930218571696 0.7050901011931916  
 0.8331612143805694 0.9161614565887777 0.5094286378131496  
 0.0834310336721715 0.4167594215439665 0.5064236660808056  
 0.8331612143805694 0.4161628776847723 0.5094286378131496  
 0.3268921298743677 0.6733173082123478 0.6380910700568770  
 0.0965216161881229 0.1733688967625949 0.6381121217999681  
 0.0965216161881229 0.6733674756665932 0.6381121217999681  
 0.3331626354765714 0.9161614565887777 0.5094286378131496  
 0.8331216249220218 0.1669814288620355 0.5093905650045786  
 0.5839897764506266 0.6669651521486599 0.5094063190485327  
 0.5965201950921213 0.1733688967625949 0.6381121217999681  
 0.2500605930794988 0.7499916384561706 0.7050901011931916  
 0.5839897764506266 0.1669665732446620 0.5094063190485327  
 0.0839911975466281 0.6669651521486599 0.5094063190485327  
 0.8331216249220218 0.6669800077660336 0.5093905650045786  
 0.4167535871162943 0.5833759865612613 0.4684644120539164  
 0.3267718505482898 0.4035470597538236 0.6381458468700641  
 0.3268921298743677 0.1733187293083424 0.6380910700568770  
 0.4981837259570743 0.7463229884434427 0.6565117440379952  
 0.4981837259570743 0.2463244095384426 0.6565117440379952  
 0.9981820939490735 0.7463228084594434 0.6565117440379952  
 0.9981820939490735 0.2463242295554381 0.6565117440379952  
 0.7537503453088400 0.5019314027113838 0.6559764986164398  
 0.7537499791268397 0.0019324199313846 0.6559764986164398  
 0.2537517664048348 0.5019314027113838 0.6559764986164398  
 0.2537514002228345 0.0019324199313846 0.6559764986164398  
 0.4982440095523791 0.5019108386112122 0.6556194246957110  
 0.4982436433703788 0.0019118558322077 0.6556194246957110  
 0.9982452197373763 0.5019106586292096 0.6556194246957110  
 0.9982448535553761 0.0019116758482084 0.6556194246957110  
 0.8267704294522881 0.9035456386578216 0.6381458468700641  
 0.8267704294522881 0.4035470597538236 0.6381458468700641  
 0.3267718505482898 0.9035456386578216 0.6381458468700641  
 0.0839911975466281 0.1669665732446620 0.5094063190485327  
 0.1670631385220870 0.3330642769898622 0.4647665925468943  
 0.5833799583765328 0.4166214787887078 0.6367351431361671  
 0.0833813794725346 0.9166200576927134 0.6367351431361671  
 0.0833813794725346 0.4166214787887078 0.6367351431361671  
 0.8268907087783659 0.6733173082123478 0.6380910700568770  
 0.2501260294804635 0.2501243140184731 0.2954833632164460

0.9161206037042978 0.8330556598934747 0.4647117181280034  
0.5965201950921213 0.6733674756665932 0.6381121217999681  
0.4161220248002997 0.8330556598934747 0.4647117181280034  
0.7508988467597394 0.5004631283644346 0.2968338428841587  
-0.0002263693948408 0.2493388257920364 0.2967601428253807  
-0.0002263693948408 0.7493374046960345 0.2967601428253807  
0.4997722095091643 0.2493388257920364 0.2967601428253807  
0.4168382646856409 0.0834721896913845 0.3403974425871697  
0.4997722095091643 0.7493374046960345 0.2967601428253807  
0.2501260294804635 0.7501228929224713 0.2954833632164460  
0.7501246083844619 0.2501243140184731 0.2954833632164460  
0.7501246083844619 0.7501228929224713 0.2954833632164460  
0.7508988467597394 0.0004645494604293 0.2968338428841587  
0.1669012119248189 0.0836055305136453 0.3372263116193512  
0.6668997908288242 0.0836055305136453 0.3372263116193512  
0.1668902278186398 0.8333993116635449 0.3373308892017334  
0.9167027462942990 0.8333929042917065 0.3372665461541305  
0.9168368435896391 0.5834707685953826 0.3403974425871697  
0.2509002678557412 0.0004645494604293 0.2968338428841587  
0.9997458219632699 0.5004719967571771 0.2967876605406898  
0.9997458219632699 0.0004734178531788 0.2967876605406898  
0.4997444008672683 0.0004734178531788 0.2967876605406898  
0.9167521660202925 0.0833774076572630 0.4684644120539164  
0.1669012119248189 0.5836041094176435 0.3372263116193512  
0.2509002678557412 0.5004631283644346 0.2968338428841587  
0.6668997908288242 0.5836041094176435 0.3372263116193512  
0.4168382646856409 0.5834707685953826 0.3403974425871697  
0.4161220248002997 0.3330570809894766 0.4647117181280034  
0.6670617174260852 0.8330628558938605 0.4647665925468943  
0.6670617174260852 0.3330642769898622 0.4647665925468943  
0.1670631385220870 0.8330628558938605 0.4647665925468943  
0.3331230460180236 0.6669800077660336 0.5093905650045786  
0.2500609080044951 0.2499932766421698 0.7050901011931916  
0.8268907087783659 0.1733187293083424 0.6380910700568770  
0.5833799583765328 0.9166200576927134 0.6367351431361671  
0.1668902278186398 0.3334007327595394 0.3373308892017334  
0.6668888067226449 0.3334007327595394 0.3373308892017334  
0.6668888067226449 0.8333993116635449 0.3373308892017334  
0.4167041673903010 0.3333943253877082 0.3372665461541305  
0.9168368435896391 0.0834721896913845 0.3403974425871697  
0.4167041673903010 0.8333929042917065 0.3372665461541305  
0.1670740311359857 0.0840177477311416 0.4647133886551951  
0.1670740311359857 0.5840163266351398 0.4647133886551951  
0.6670726100399840 0.0840177477311416 0.4647133886551951  
0.6670726100399840 0.5840163266351398 0.4647133886551951  
0.4167535871162943 0.0833774076572630 0.4684644120539164  
0.9167027462942990 0.3333943253877082 0.3372665461541305  
0.4997444008672683 0.5004719967571771 0.2967876605406898  
0.9161206037042978 0.3330570809894766 0.4647117181280034  
0.9167521660202925 0.5833759865612613 0.4684644120539164

**Pandey et al. 2 by 1 reconstruction Si<sub>96</sub>H<sub>16</sub>**

## Lattice vectors

```

7.6800499999999996 -13.3022368046690005 0.0000000000000000
7.6800499999999996 13.3022368046690005 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.541399999999999

```

## Fractional coordinates

## H

```

0.0131478431718193 0.2731465277896358 0.2144520026015612
0.4919980272199697 0.4809296792829370 0.2099365098940899
0.0131478431718193 0.7731451066936340 0.2144520026015612
0.5131464220758173 0.2731465277896358 0.2144520026015612
-0.0080005516840286 0.9809311003789385 0.2099365098940899
-0.0080005516840286 0.4809296792829370 0.2099365098940899
0.4919980272199697 0.9809311003789385 0.2099365098940899
0.7419947774282699 0.9809287122554925 0.2099358120434597
0.5131464220758173 0.7731451066936340 0.2144520026015612
0.2631472039644627 0.7731443640949394 0.2144514139263066
0.7631457828684610 0.2731457851909415 0.2144514139263066
0.7631457828684610 0.7731443640949394 0.2144514139263066
0.2419961985242646 0.9809287122554925 0.2099358120434597
0.2419961985242646 0.4809272911594910 0.2099358120434597
0.7419947774282699 0.4809272911594910 0.2099358120434597
0.2631472039644627 0.2731457851909415 0.2144514139263066

```

## Si

```

0.7954854475437328 0.8374938512522445 0.69779833993579 T
0.7954854475437328 0.3374952723482388 0.6977983399357969
0.2954868686397347 0.8374938512522445 0.6977983399357969
0.2954868686397347 0.3374952723482388 0.6977983399357969
0.6290102442656590 0.2545450191485470 0.6653924724725295
0.1290116653616608 0.7545435980525524 0.6653924724725295
0.6290102442656590 0.7545435980525524 0.6653924724725295
0.0454866069709090 0.3374946542234742 0.6977985324366851
0.0462957365335345 0.5892356074713749 0.6236380093761482
0.0454866069709090 0.8374932331274724 0.6977985324366851
0.5462943154375398 0.0892370285673769 0.6236380093761482
0.5454851858749072 0.8374932331274724 0.6977985324366851
0.2962967265306513 0.0892375732036658 0.6236375726555208
0.2962967265306513 0.5892361521076713 0.6236375726555208
0.7962953054346562 0.0892375732036658 0.6236375726555208
0.7962953054346562 0.5892361521076713 0.6236375726555208
0.0462957365335345 0.0892370285673769 0.6236380093761482
0.4191454990148687 0.3351330799974045 0.3427347789415042
0.1290116653616608 0.2545450191485470 0.6653924724725295
0.5462943154375398 0.5892356074713749 0.6236380093761482
0.5454851858749072 0.3374946542234742 0.6977985324366851
0.9188198132272192 0.0843911866232726 0.4506593049948729
0.5809761162572628 0.6586904600407969 0.5023338007812174
0.1192771996959720 0.9851980056781711 0.6256822157813164
0.3391524422560196 0.4250506696275359 0.5055270512247844
0.3391524422560196 0.9250492485315341 0.5055270512247844
0.8391510211600179 0.4250506696275359 0.5055270512247844
0.8391510211600179 0.9250492485315341 0.5055270512247844

```

0.0891528903917676 0.4250516155676362 0.5055279788328179  
0.0891528903917676 0.9250501944716347 0.5055279788328179  
0.5891514692957660 0.4250516155676362 0.5055279788328179  
0.5891514692957660 0.9250501944716347 0.5055279788328179  
0.3309769337172778 0.1586914209563592 0.5023334928321024  
0.3309769337172778 0.6586899998603576 0.5023334928321024  
0.8309755126212762 0.1586914209563592 0.5023334928321024  
0.8309755126212762 0.6586899998603576 0.5023334928321024  
0.0809775373532645 0.1586918811367988 0.5023338007812174  
0.0809775373532645 0.6586904600407969 0.5023338007812174  
0.5809761162572628 0.1586918811367988 0.5023338007812174  
0.3692761539402240 0.4851984233717488 0.6256810008522633  
0.4183571775863994 0.3334721041793583 0.4717903706297272  
0.4183571775863994 0.8334706830833564 0.4717903706297272  
0.9183557564904048 0.3334721041793583 0.4717903706297272  
0.9183557564904048 0.8334706830833564 0.4717903706297272  
0.1192771996959720 0.4851994267741659 0.6256822157813164  
0.6192757785999773 0.4851994267741659 0.6256822157813164  
0.3692761539402240 0.9851970022757471 0.6256810008522633  
0.3790117948620155 0.7545440341815260 0.6653920251512321  
0.8692747328442223 0.9851970022757471 0.6256810008522633  
0.4196206434564074 0.0860723538722203 0.3244927698799495  
0.4196206434564074 0.5860709327762186 0.3244927698799495  
0.9196192223604127 0.0860723538722203 0.3244927698799495  
0.9196192223604127 0.5860709327762186 0.3244927698799495  
0.1691447411520505 0.3351325864764498 0.3427349890081891  
0.1691447411520505 0.8351311653804482 0.3427349890081891  
0.6691433200560488 0.3351325864764498 0.3427349890081891  
0.6691433200560488 0.8351311653804482 0.3427349890081891  
0.0001433517171950 -0.0028722036676560 0.2902593286691713  
0.6696198984518181 0.5860714238817923 0.3244930999957318  
0.0001433517171950 0.4971263752363494 0.2902593286691713  
0.5001419306211934 0.4971263752363494 0.2902593286691713  
0.4188212343232210 0.0843911866232726 0.4506593049948729  
0.4188212343232210 0.5843897655272708 0.4506593049948729  
0.2501429451898239 -0.0028726235227896 0.2902602920684620  
0.5051387660881912 0.2571294987019974 0.2948334077961166  
0.6688194867175687 0.5843895953139613 0.4506598362439074  
0.6688194867175687 0.0843910164099632 0.4506598362439074  
0.1688209078135704 0.0843910164099632 0.4506598362439074  
0.1688209078135704 0.5843895953139613 0.4506598362439074  
0.5001419306211934 -0.0028722036676560 0.2902593286691713  
0.6696198984518181 0.0860728449777940 0.3244930999957318  
0.1696213195478199 0.5860714238817923 0.3244930999957318  
0.1696213195478199 0.0860728449777940 0.3244930999957318  
0.1683570264650147 0.3334723786852159 0.4717903465990650  
0.1683570264650147 0.8334709575892143 0.4717903465990650  
0.6683556053690132 0.3334723786852159 0.4717903465990650  
0.6683556053690132 0.8334709575892143 0.4717903465990650  
0.3790117948620155 0.2545454552775280 0.6653920251512321  
0.9191440779188741 0.3351330799974045 0.3427347789415042  
0.8790103737660137 0.2545454552775280 0.6653920251512321  
0.8790103737660137 0.7545440341815260 0.6653920251512321

|                    |                     |                    |
|--------------------|---------------------|--------------------|
| 0.4191454990148687 | 0.8351316589014028  | 0.3427347789415042 |
| 0.6192757785999773 | 0.9851980056781711  | 0.6256822157813164 |
| 0.9191440779188741 | 0.8351316589014028  | 0.3427347789415042 |
| 0.2501429451898239 | 0.4971259553812087  | 0.2902602920684620 |
| 0.7501415240938221 | -0.0028726235227896 | 0.2902602920684620 |
| 0.7501415240938221 | 0.4971259553812087  | 0.2902602920684620 |
| 0.0051401871841928 | 0.2571294987019974  | 0.2948334077961166 |
| 0.0051401871841928 | 0.7571280776060031  | 0.2948334077961166 |
| 0.5051387660881912 | 0.7571280776060031  | 0.2948334077961166 |
| 0.2551403940178805 | 0.2571299380866930  | 0.2948318635044633 |
| 0.2551403940178805 | 0.7571285169906977  | 0.2948318635044633 |
| 0.7551389729218860 | 0.2571299380866930  | 0.2948318635044633 |
| 0.7551389729218860 | 0.7571285169906977  | 0.2948318635044633 |
| 0.8692747328442223 | 0.4851984233717488  | 0.6256810008522633 |
| 0.9188198132272192 | 0.5843897655272708  | 0.4506593049948729 |

### 7 x 7 reconstruction (DAS model) Si<sub>200</sub>H<sub>49</sub>

#### Lattice vectors

|                     |                    |                    |
|---------------------|--------------------|--------------------|
| 26.880099999999998  | 0.0000000000000000 | 0.0000000000000000 |
| -13.439999999999999 | 23.278800000000004 | 0.0000000000000000 |
| 0.0000000000000000  | 0.0000000000000000 | 20.406099999999999 |

#### Fractional coordinates

##### H

|                    |                    |                    |
|--------------------|--------------------|--------------------|
| 0.8633018777327162 | 0.8509506627638928 | 0.0312528079473771 |
| 0.8571826279394342 | 0.2859073877906179 | 0.0522118273998792 |
| 0.7234184724506854 | 0.3054843285834278 | 0.0459528748026436 |
| 0.5700677524201903 | 0.2858226941976990 | 0.0523083578481050 |
| 0.4391940959503383 | 0.3041363994974837 | 0.0413931021264985 |
| 0.2922281868547610 | 0.2798941957873528 | 0.0312382051774901 |
| 0.1292513282423875 | 0.2799155830122923 | 0.0311218586537201 |
| 0.0063542962254059 | 0.3041517529943922 | 0.0412525218683184 |
| 0.8389660386706875 | 0.1367641688978700 | 0.0412748770763387 |
| 0.7249825812093286 | 0.1382988530672491 | 0.0416196883826513 |
| 0.5546511423743800 | 0.1381992703914324 | 0.0416858649723420 |
| 0.4392943508000225 | 0.1368160162235729 | 0.0412937815815054 |
| 0.2704949920851133 | 0.1360385439605059 | 0.0371396079598303 |
| 0.1342634920896168 | 0.1270110075444569 | 0.0603337568030009 |
| 0.0070000217329096 | 0.1361116682903502 | 0.0370904245589402 |
| 0.8632603406564862 | 0.0138944745900088 | 0.0311500056759135 |
| 0.7150517125840009 | 0.0007024014728419 | 0.0545876780389051 |
| 0.5768995339353591 | 0.0124734058115240 | 0.0324989592224732 |
| 0.4273073448816853 | 0.0006604722041763 | 0.0545292138264707 |
| 0.2919831293035593 | 0.0138368793945706 | 0.0311424205474287 |
| 0.1341762773535724 | 0.0089003588104034 | 0.0603718938711288 |
| 0.0161284331352711 | 0.0088437597428497 | 0.0603586535182893 |
| 0.0048066803950657 | 0.4181322060508765 | 0.0415723215525862 |
| 0.1424604679028045 | 0.4281079228952868 | 0.0545465612907897 |
| 0.6923692888304174 | 0.8470135910926501 | 0.0456022410232430 |
| 0.4273465421960037 | 0.4280814056339398 | 0.0547370778017558 |
| 0.2961388046765238 | 0.4507832611985634 | 0.0455782393577756 |
| 0.5814152882430513 | 0.8484070738342704 | 0.0458635774044643 |
| 0.4085998102868278 | 0.8484325450716635 | 0.0457853201151254 |

0.2962278186694355 0.8469194803367254 0.0456019783173570  
0.0070820557063544 0.8726435829087130 0.0371510321696390  
0.8389631211314158 0.7039005879722329 0.0413794332970005  
0.7150475496549605 0.7157797120364479 0.0547413120477348  
0.5813122328065387 0.7344885420623249 0.0458634026698382  
0.4283531306410672 0.7148603820604463 0.0556982526747818  
0.2947112028144299 0.7345497270519030 0.0457644408533456  
0.1424995067084830 0.7158268614509058 0.0544991962235083  
0.1292861578665250 0.8511628008475132 0.0311261272199351  
0.8572796453179291 0.5730452487457258 0.0522857688082273  
0.0062805580464471 0.7037903260561547 0.0412619658511424  
0.7234362231965901 0.4196591725584601 0.0459778358087652  
0.0049131618713296 0.5884612680985973 0.0416466902156265  
0.1306567394958246 0.5662558309488223 0.0324447401619804  
0.8376251109177797 0.4196858743128983 0.0459336972164783  
0.4086646628838196 0.5618199167705946 0.0458497895314156  
0.5770796159109386 0.5661005108566244 0.0326640932901134  
0.7249903545633133 0.5883811658154804 0.0417610696665264  
0.2947381728307742 0.5617312759681774 0.0458275621255581  
0.5547480107368847 0.4181319164833157 0.0417545732619096

Si

0.2918446420154798 0.1466897695359910 0.3048615885241135  
-0.0035886365513663 0.1467273110603936 0.3047763698033498  
0.4211349465256549 0.1432742415767878 0.3063810077015393  
0.5774881804446641 0.1446562952723265 0.3060129660184133  
0.7087880535768040 0.1445857137325202 0.3059960160087317  
0.8637346654810696 0.1433704661428244 0.3063047070295683  
0.8588579683009177 0.2842773953325190 0.3358348125150639  
0.4211288069038671 0.2793679032037207 0.3063529914746979  
0.5668616216444071 0.2842113745945221 0.3359321458883796  
0.7115249778726498 0.2815107445885479 0.3058608807563199  
-0.0002363248087205 0.2794040781245725 0.3062960172990086  
0.1897339117151016 0.3739844491764175 0.3019553568943568  
0.3258436497078185 0.3739959823326781 0.3020212352441441  
0.9295413003641587 0.8818364723631044 0.2660924677589592  
0.1926638078923559 0.2438680956435744 0.3011835593697698  
0.8097886372548220 0.9055971872104808 0.2414116586977256  
0.0940128491174267 0.7915841757870568 0.2687030553726813  
0.5232729849566342 0.9050117489070235 0.2438769778258836  
0.2381031533220584 0.6198442474690906 0.2438412763227500  
0.3762641948859576 0.6109062645528573 0.2827660693475757  
0.5233755075459035 0.6197448278595087 0.2438982747261470  
0.6401434435741647 0.5925853225569043 0.2691492515063853  
0.8108951161503603 0.6203621616954660 0.2811256443309203  
0.9510713084618541 0.6203671228315188 0.2810664693114264  
0.5774541080280422 0.4343244250899369 0.3060950226984867  
0.6662820011284680 0.9028444357147923 0.2817259795944825  
0.2403279047311245 0.7649952321511975 0.2816325627106122  
0.5322201652885905 0.7668612312368382 0.2827969988969425  
0.6662348185511815 0.7650678114159718 0.2817774865130924  
0.8391956205318249 0.7916403481751979 0.2688757974061614  
0.9515506308913170 0.7615026485021670 0.2452089976897271

0.0938368900012730 0.8817923030145046 0.2660146479450929  
0.2374802704824533 0.9056370047824412 0.2413275707578495  
0.3781173953163989 0.9027878653151408 0.2816514317622820  
0.3762930177979696 0.7668220473202617 0.2826127225895563  
0.7115590852293564 0.4315697085379352 0.3059453910203235  
0.6129144536049165 0.6618699928051833 0.3037657200436019  
-0.0014602188203800 0.4343378515892162 0.3059566648649985  
0.6128638959112905 0.9526015655544038 0.3036711420421717  
0.0940085187597259 0.5926097021227422 0.2689273963207368  
0.8992688458017445 0.9504631813665639 0.3012047185661536  
0.3793463197095715 0.1904164670518404 0.3705008698210282  
0.6665065838066448 0.1913393193923586 0.3683316582448897  
0.9526097480828902 0.1905338687230654 0.3704053771075290  
0.6664786968604293 0.4766430171225465 0.3684410076764720  
0.9517822839788755 0.4766122613897553 0.3682943093674593  
0.2367473025477543 0.3319557222589166 0.3648290358976616  
0.9527016511925738 0.7637503114383899 0.3704912129359427  
0.2375937021242109 0.6195884326306956 0.3653944123037339  
0.5235785185357457 0.6195353893033299 0.3654803544765503  
0.2367825192390035 0.9063210246486800 0.3647490083035803  
0.5235234775833857 0.9055198496452725 0.3654291861392294  
0.8111762456387572 0.9063709732459981 0.3648405752471428  
0.4812454755236517 0.9525969820673645 0.3037027227324438  
0.3258375406005126 0.9533862207833804 0.3019507972240307  
0.1927158027434522 0.9503937971697656 0.3010916849184588  
-0.0035639614592834 0.8512627892000010 0.3048651689268605  
0.1905140909156108 0.5302535064693792 0.3036278851066279  
0.3309755582309371 0.5204885400706912 0.3397292115344654  
0.4812459368891180 0.5302029648543172 0.3037563711940453  
0.7088020931132041 0.5656707436317322 0.3060968875140978  
0.8589154761984467 0.5762541853254526 0.3359190493607525  
-0.0015342412840573 0.5656341513184554 0.3059769896208487  
0.1905124775299538 0.6618643165821407 0.3036700352500653  
0.8616151575270504 0.4316000079246923 0.3058387619476156  
0.3278348434548872 0.6646432732925239 0.3027134669467444  
0.8637584905633400 0.7219797612802360 0.3063366741256559  
-0.0001618661078009 0.7219675545893748 0.3063517937131380  
0.1897208619747648 0.8172683547200672 0.3019293969555072  
0.3310760184109159 0.8120270387737397 0.3394840913733684  
0.4784718040594177 0.8152797479351745 0.3027406558446965  
0.6226431167156974 0.8121454716640337 0.3397537124202110  
0.7691361618805207 0.8172746304138132 0.3020220457416587  
0.4784737515556832 0.6646484722883375 0.3027234637451129  
0.7691497332930830 0.9533900997177867 0.3019728849596728  
0.0100232951944979 0.0058536993824570 0.1341348001329059  
0.6671068236821239 0.4760102907217253 0.2461104362021478  
0.5727756506733217 0.5703722631622598 0.1057166016740522  
0.7171941928543909 0.5762162507796188 0.1142334594407008  
0.8570819932444502 0.5726911400281133 0.1260909617885063  
0.0011139678020796 0.7120950850811920 0.1133618845747307  
0.1421253540070408 0.7155763701452181 0.1284055901963390  
0.2879451137357186 0.7202336867887029 0.1177090184741475  
0.4282965631769932 0.7148658955072494 0.1296348913771923

0.5738680225890452 0.7202260031345633 0.1178082150116824  
0.7150538458069008 0.7155856782029805 0.1286837604943933  
0.8525138022952889 0.7121340186801702 0.1134705221250310  
0.0018545733926367 0.8621648613189411 0.1099733971956589  
0.1386990401615726 0.8569380300945403 0.1040484203163082  
0.2880244761225691 0.8551117702636774 0.1169558321262294  
0.4229045582695307 0.8551964168814230 0.1177293243517067  
0.5738726692204067 0.8551778850834681 0.1178045089636873  
0.7086491219065293 0.8551099844978612 0.1169951487866545  
0.8597525511280079 0.8568774685925853 0.1041608186535569  
0.0948799659976043 0.0482843590771894 0.2003549450711664  
0.2373196756106597 0.0473887461115594 0.1535885577962350  
0.3765433932302609 0.0486114165498687 0.1566589975817006  
0.5261499362658959 0.0485815896889665 0.1564783043148752  
0.6639295147427979 0.0485531750395570 0.1563961638150572  
0.8135953349933727 0.0486483190291994 0.1567201930373737  
0.9515720656645933 0.0474297542979471 0.1535622080206321  
0.0957093436517543 0.1915788946350729 0.1535425752258817  
0.2373230527482559 0.1915252822935971 0.1536003279563028  
0.3804783732250754 0.1910354612033630 0.1294240561583464  
0.4229188813181838 0.5692765254807836 0.1177944152996308  
0.5226190568683902 0.1902574604798866 0.1633146706517659  
0.2879665337130901 0.5692745153314582 0.1177697786001886  
0.0005520387329081 0.5762541309566481 0.1140859940501385  
0.1373033745634795 0.0058175477532590 0.1341372610147055  
0.2861942146601301 0.0044253473903142 0.1040637101417961  
0.4275572128753780 0.0010130405100650 0.1284360761142511  
0.5726911936719429 0.0039056133627197 0.1055633904217775  
0.7150085338849175 0.0010231155965570 0.1284888970485275  
0.8597125970477494 0.0044426793144522 0.1040665953296341  
0.0018105611709386 0.1413252099143467 0.1099301116884756  
0.1372796068806374 0.1331260935601105 0.1341060326299243  
0.2809567152478045 0.1412701036320896 0.1099643908575733  
0.4310194713325921 0.1420052498505912 0.1133940713846698  
0.5668656341453684 0.1425712680145397 0.1141244387296776  
0.7171617823337771 0.1425825370401755 0.1140766610701517  
0.8524766652146263 0.1420233714696315 0.1133767076386937  
0.0011118118112883 0.2906580877106055 0.1133563042803064  
0.1386959312665945 0.2834391499504098 0.1040400833148669  
0.2862659713709549 0.2833997563156858 0.1041489063783598  
0.4309832788821845 0.2906123800446636 0.1134871857541497  
0.5704244369816946 0.2860349617336476 0.1261151321914387  
0.7166519151292163 0.2919064037594808 0.1181294846321720  
0.8570458540009251 0.2860711662025572 0.1260150075315080  
0.0005415032174889 0.4259631004060448 0.1140352665670354  
0.1421221136205437 0.4281411199267776 0.1284456016409255  
0.2880356082824670 0.4344993456301940 0.1169712155575247  
0.4275531893870994 0.4280874922514608 0.1286785978948156  
0.5669070901680772 0.4259293769752290 0.1142328060392904  
0.7166922661566081 0.4264184305018487 0.1181633254051053  
0.8512100821189619 0.4264627753495860 0.1181100201164670  
0.1392240326396696 0.5704495189435794 0.1055098605503965  
0.6666557727542699 0.1918751287896372 0.1307156497905991

0.8091171547293193 0.1902727874956307 0.1632494823039475  
0.9520515430621808 0.1910845575636182 0.1293795201891863  
0.6666142965279136 0.9054791305645429 0.1651278365166901  
0.8092666120799648 0.9054311533443171 0.1264168667178533  
0.9516160365348912 0.9058075971172741 0.1536334893301501  
0.2613098671451478 0.0492800813282516 0.2660161892337845  
0.3515103527928399 0.0491012838215205 0.2687353031546182  
0.5505048935200929 0.0491114139505140 0.2689718070837400  
0.64011411104524192 0.0490851519872941 0.2689082556488485  
0.8391101858428103 0.0491218180871635 0.2687934564053059  
0.9294840515297652 0.0492900325985927 0.2660331122818786  
0.0938367010705674 0.2136488537020301 0.2660156227243883  
0.2612777753720792 0.2135841519255826 0.2660724792381335  
0.3816096102560320 0.1915651682100567 0.2452296288868996  
0.5227387357167543 0.1920438046800371 0.2811027380658949  
0.6671408212421021 0.1925866759483620 0.2460409619084793  
0.8108796874407349 0.1921069169814701 0.2810212518166422  
0.9515470653562432 0.1915752824977964 0.2451526653777636  
0.0940082301862665 0.3040304103877726 0.2687642315516304  
0.2375330953517509 0.3333495585830392 0.2413955291822872  
0.3514748917781620 0.3039322745856901 0.2688782913309225  
0.5227422673770422 0.3322172090443365 0.2811354256977249  
0.6589887379512618 0.3302625277436614 0.2829491596607424  
0.8127917415454949 0.3303235541219356 0.2828710199023544  
0.9510166591976889 0.3322440003057542 0.2809960403046451  
0.0940395309963482 0.5030071802389350 0.2688528016532974  
0.2402852979098313 0.4768538578518079 0.2816918381195650  
0.3780566157406616 0.4768979720454624 0.2817642192021270  
0.5505328822940638 0.5029753401963174 0.2691391647499282  
0.5233179240040985 0.9050382086296231 0.1294455810677999  
0.3804309311423594 0.9054708052977146 0.1650651943075023  
0.2377077681028277 0.9054159413628333 0.1263427191786636  
0.0957348546620175 0.9058011768884705 0.1535978733806500  
0.0944930864374698 0.3295569688703654 0.1566946423132750  
0.2377077785106730 0.3338832161043213 0.1264022917378802  
0.3765280818912642 0.3295033590453204 0.1568557103640298  
0.5226036804109018 0.3339643197381101 0.1633481964703385  
0.6655620932982652 0.3336111118113326 0.1649466537799363  
0.8094779716853672 0.3336452492457054 0.1648791682205070  
0.9528525915320579 0.3340122130282355 0.1632203340070678  
0.0945755295945623 0.4792074430619250 0.1563377540941542  
0.2376655462599551 0.4765330585249394 0.1650953431501633  
0.3804329238805045 0.4765162297139819 0.1651630682159434  
0.5261361212009600 0.4791493399876972 0.1566312040359645  
0.6666962099407389 0.4764249402092462 0.1307949278223544  
0.8095079997521640 0.4775529520859857 0.1649317191327736  
0.8128610715146640 0.4841357734129298 0.2829317461626003  
0.9512438928340470 0.4764621055459854 0.1306816461099464  
0.2380936917910282 0.6198184004023587 0.1294092070195239  
0.3802276135550245 0.6188713449755833 0.1659115358599633  
0.5233404044998486 0.6198035990683718 0.1295002425661791  
0.6639889990628467 0.6170028180742907 0.1566485341008891  
0.8091597640860760 0.6205146068176546 0.1633385627661554

|                    |                    |                    |
|--------------------|--------------------|--------------------|
| 0.9528600753277038 | 0.6204931138057987 | 0.1632762698979822 |
| 0.0945128331173037 | 0.7665786924679155 | 0.1566175819543686 |
| 0.2376655440134423 | 0.7626973967858997 | 0.1650479087526749 |
| 0.3802585788597888 | 0.7628739824412242 | 0.1657919430703371 |
| 0.5242794838917436 | 0.7629150756460275 | 0.1659446678638213 |
| 0.6666258063355521 | 0.7627047290866733 | 0.1651744854363957 |
| 0.8136406737502507 | 0.7666031466735300 | 0.1568422356691599 |
| 0.9520891293735378 | 0.7626391130162951 | 0.1293971549157464 |
| 0.0945454764570911 | 0.6169807877665709 | 0.1564415837095157 |
| 0.9505211476383563 | 0.4759718034157359 | 0.2460060102203553 |

## WSi<sub>12</sub> absorbed on 7 x 7 surfaces

### Site B WSi<sub>12</sub>H<sub>49</sub>

#### Lattice vectors

|                     |                    |                    |
|---------------------|--------------------|--------------------|
| 26.880099999999988  | 0.0000000000000000 | 0.0000000000000000 |
| -13.439999999999995 | 23.278800000000004 | 0.0000000000000000 |
| 0.0000000000000000  | 0.0000000000000000 | 28.000000000000000 |

#### Fractional coordinates

#### H

|                    |                     |                    |
|--------------------|---------------------|--------------------|
| 0.0147760674163479 | 0.0068287185217357  | 0.0880756457788187 |
| 0.0012681022115281 | 0.5835074254658630  | 0.0736812200136926 |
| 0.1405017934298319 | 0.5664637634895098  | 0.0720632869233863 |
| 0.279866698356924  | 0.5595099949933264  | 0.0770364229382135 |
| 0.4108171210791935 | 0.5500931206336027  | 0.0732532547644580 |
| 0.5770952877353208 | 0.5608551684017371  | 0.0690511953310469 |
| 0.7218622071904117 | 0.5841587542994463  | 0.0753146303205186 |
| 0.8550007437093867 | 0.5691591635595898  | 0.0821493047766786 |
| 0.0047101662292836 | 0.7017096236566248  | 0.0737013338764347 |
| 0.2862597636372521 | 0.7178296683536693  | 0.0775776686466270 |
| 0.8351763607188466 | 0.4156728008699589  | 0.0791253921075142 |
| 0.7205778053646541 | 0.4154484605480302  | 0.0797109725857291 |
| 0.7129338682839638 | 0.7112573980426288  | 0.0839822215392953 |
| 0.8381776454512865 | 0.7012356692154683  | 0.0739117153987487 |
| 0.0066594320377888 | 0.8705772116394166  | 0.0712789250810239 |
| 0.1242085632300438 | 0.8481817745716982  | 0.0655398359101658 |
| 0.3032809545704725 | 0.8499634229999118  | 0.0755587120446181 |
| 0.4088953577241097 | 0.8542479664055810  | 0.0770407405905331 |
| 0.5808292222521614 | 0.8485591108365346  | 0.0772798493345153 |
| 0.6912791802400138 | 0.8453273384083319  | 0.0774061121570739 |
| 0.8621892173123683 | 0.8492207205629407  | 0.0665064155915837 |
| 0.5810536512600458 | 0.7319188808228827  | 0.0765293358516849 |
| 0.1359840655028721 | 0.7103186268353514  | 0.0816646186918706 |
| 0.5527179158702210 | 0.4146184804015721  | 0.0770997111920449 |
| 0.4316964378215858 | 0.7188761154466973  | 0.0796553166130343 |
| 0.2965910329123055 | 0.4511514508988355  | 0.0786524413590479 |
| 0.5525604152833236 | 0.1347205091800522  | 0.0786195961750408 |
| 0.4252862206803645 | -0.0039882753238329 | 0.0892171445122079 |
| 0.5765754910180219 | 0.0138960195396289  | 0.0711709802942588 |

0.7128498343667578 0.0005387652183141 0.0854425381601951  
0.8620727197567134 0.0119586775693887 0.0673031430545505  
0.0064435817829568 0.1348698209661464 0.0724557037055980  
0.1344708982862528 0.1256185825273495 0.0897595160656534  
0.2695382060891244 0.1335863600963939 0.0745898794540575  
0.4377259011771686 0.1337317631697880 0.0783387792288146  
0.1352367116992036 0.0081773533640954 0.0892258825191544  
0.1377861054961476 0.4249639604613544 0.0850084956388201  
0.2956660500984580 0.0204665715255912 0.0686719262741887  
0.4252004300145316 0.4253049680260222 0.0868131987837554  
0.0049076728305604 0.3014313288241580 0.0759584094828998  
0.1255174728809854 0.2758800428513680 0.0679251701347937  
0.2928475125902256 0.2749589677324805 0.0688870789160840  
0.4373817854318540 0.3002869086924215 0.0774096430870770  
0.5680674237721487 0.2822250132657275 0.0853927698363832  
0.7209205214857903 0.3019878644884180 0.0803902860777254  
0.8554896036344106 0.2836645131445795 0.0839739158408547  
0.0053580742707367 0.4166753014506671 0.0768515402151196  
0.7218695769211689 0.1351440657622411 0.0772019335482285  
0.8380088024103951 0.1352807436078007 0.0755525359482147

Si

0.8087393671165635 0.9033862701805290 0.2200253805374774  
0.5314500817378798 0.7645464058879554 0.2484988693007810  
0.6649869740310929 0.7620955009012677 0.2488731606441170  
0.8378158170272669 0.7894120210038539 0.2393547665991496  
0.5235364976912361 0.9049196142588950 0.2235288507653878  
0.0948253514265527 0.8808954952054366 0.2385765266860066  
0.2363959604133838 0.9047021864275600 0.2177196618531386  
0.3761869704621021 0.9038427757676663 0.2538294503617186  
0.9498199433383538 0.7589088440983637 0.2216970915173888  
0.3818311224271240 0.7654011846709050 0.2438264575978309  
0.9283854951340348 0.8795158954108784 0.2377144183981093  
0.9960100953220914 0.1442418592106863 0.2665226337177184  
0.2888827633525520 0.1432158493550675 0.2677660953702631  
0.4192623964260094 0.1393494726053366 0.2696572581647204  
0.5760513508625587 0.1419107733374299 0.2710016151040575  
0.7075312061928690 0.1422770794124172 0.2700337194947234  
0.1928187748827689 0.2445517714229425 0.2670515905614129  
0.4197973795131203 0.2778031119167093 0.2693619370451082  
0.5655988109506653 0.2820072194743698 0.2924326046370415  
0.7100750530370077 0.2791393224664207 0.2699720949570871  
0.8575503263015790 0.2817485710072786 0.2909149836134565  
0.6649093031750379 0.9006388677017307 0.2496959285485823  
0.8618750043594281 0.1405015463980547 0.2681833054627579  
0.2308499688385069 0.7640636645921365 0.2425194734899294  
0.9500443401934270 0.1891820318205681 0.2237561490837072  
0.1894587503970731 0.3684382520992154 0.2676271629944484  
0.6652247560292825 0.1899520432241078 0.2267848095883894  
0.0937127701396861 0.3017689815674582 0.2416681891710959  
0.2363202262065732 0.3306267391435959 0.2207930369188286  
0.3492822751253248 0.3018677342517054 0.2429611741081394  
0.5217610816241367 0.3300642399313560 0.2519767948503107  
0.6574800181835277 0.3277702712610215 0.2532784210626125

0.8110722250296877 0.3275978904881249 0.2524023427022961  
0.9493405437310305 0.3296009210842161 0.2505266314580762  
0.0914426654417639 0.5001886803671740 0.2432586005976846  
0.2305522833455224 0.4692390723355282 0.2482965332326006  
0.3787795713481599 0.4711937643355228 0.2512479055739218  
0.5493941021127583 0.5008585793384071 0.2422257117025598  
0.6652521771413649 0.4729882722932600 0.2253855491255120  
0.8110423522659290 0.4816739613504523 0.2511979927243129  
0.9477340582852849 0.4728815605950488 0.2244779164693157  
0.0887856798290667 0.5890184711282489 0.2391269114691797  
0.2376078145590632 0.6177566903050521 0.2380197944634635  
0.3820414026049405 0.6139984527977375 0.2377819107785380  
0.5240971386159384 0.6171902522837466 0.2214208850460288  
0.6391297746297769 0.5903617919572104 0.2416477829463231  
0.8090552837522625 0.6172809107581041 0.2488077845352601  
0.0941402572953871 0.7903422117730332 0.2393219224055335  
-0.0008241585266079 0.2774642672779200 0.2681328671497984  
0.9486823279694502 0.6179364694432786 0.2483719498701894  
0.1390154186435846 0.7125763713612078 0.1354273534695756  
0.8554607005646647 0.5696881666323237 0.1359160825384014  
0.3772153373216033 0.1876446275111065 0.3127729274083001  
0.6657887963160172 0.1893193568694028 0.3156589790888302  
0.9515435149098788 0.1876443070285654 0.3128795551671616  
0.2342920917164535 0.3285348249984397 0.3213715008924844  
0.6659218478004264 0.4750714536376261 0.3143385233115830  
0.9493899215376039 0.4745917899507271 0.3137030597186478  
0.2071610090851551 0.6630853632216895 0.3406235687649836  
0.5229488380360138 0.6187147937197581 0.3137475854883190  
0.9516883632718930 0.7614858471898789 0.3099373238297402  
0.2324541510139533 0.9025368590469579 0.3262411581966572  
0.5233823294708027 0.9024226246085035 0.3155305080474766  
0.8097720417331505 0.9034327879919937 0.3098505566881110  
0.8980345574785060 0.9478891562944690 0.2637493403346597  
0.3203042935223098 0.3689427877519942 0.2687649819840216  
0.7677363352478980 0.9506446372567664 0.2644189645128436  
0.4803691881666363 0.9489654554225347 0.2694499053777690  
0.7101587512418949 0.4291643117652968 0.2691038431120371  
0.8592911843327097 0.4289251352843056 0.2682269524540434  
0.9957504286897343 0.4318005893488741 0.2685442583933255  
0.1856657416391281 0.5244744737384918 0.2748063676374106  
0.3289634262109452 0.5208948068014635 0.2745260249877161  
0.4817796617016127 0.5299476403474415 0.2674372070973373  
0.7074823511217654 0.5633359285171191 0.2682422386586099  
0.8574515227106492 0.5741858105711709 0.2893383163081815  
0.9949746364962351 0.5629150067980209 0.2676122203641776  
0.3162733017961942 0.9469958020996598 0.2701369531628006  
0.3367771976188915 0.6665765281343934 0.2606785235836192  
0.4803217333428729 0.6627895407030368 0.2631351535464552  
0.2161618827350401 0.5463539091024404 0.4394509293391246  
0.8616551364933206 0.7190733183479394 0.2661445314083541  
-0.0004782235295077 0.7198058407655894 0.2655265353682801  
0.1901113423455537 0.8223502192952032 0.2665773629493732  
0.3249875814311702 0.8029638571589821 0.2773033769818584

0.4811067663101620 0.8156621306263862 0.2653042417830059  
0.6212692781188024 0.8092221381897763 0.2905690925958193  
0.7676785583423006 0.8147021939582508 0.2638246317473938  
0.9962800342919547 0.8497655210630344 0.2647166277136996  
0.1937104933637931 0.9448293896849960 0.2673974337347323  
0.5214340271624172 0.1895278387312727 0.2528033579063043  
0.6116957849931913 0.9502337669417517 0.2675480820254599  
0.3804293602832682 0.1890663794339531 0.2253256883728555  
0.6628477233935168 0.6142016445287225 0.1595653699528517  
0.0941275270909686 0.2117730995257907 0.2397910267478376  
0.8491749422372741 0.4231571535552244 0.1316120686913479  
-0.0017972864764163 0.5728361205431355 0.1266270166999567  
0.1409030748521256 0.5685276238636955 0.1256896030926550  
0.2830387557459949 0.5665798271630772 0.1304623762201253  
0.4233839780831812 0.5638635898106265 0.1254297707534547  
0.5720856215833221 0.5670632085678656 0.1218919717428906  
0.7154342480541362 0.5731033795058348 0.1282511558883058  
0.8093221276671927 0.1898416100929455 0.2506918779383487  
0.5762213003108435 0.4323644239534470 0.2696265653446693  
0.0002512551591064 0.7100154429549552 0.1263683842346952  
0.5224653860238835 0.9037668798761817 0.1399765415333495  
0.2842160965166071 0.7141378590522920 0.1312672990325641  
0.7135087357453048 0.7124709876357885 0.1378059467364235  
0.8512134786993303 0.7095951499206099 0.1265329938426888  
0.0015406384936948 0.8605670686246010 0.1243892040649512  
0.1379554977006514 0.8555316724330930 0.1180118742475141  
0.2882556438068773 0.8555796671959274 0.1263069685414525  
0.4225034999139484 0.8560144625255768 0.1293116409194657  
0.5727687145410377 0.8538484460668744 0.1298194814307719  
0.7073159912687111 0.8529075350169276 0.1294695795162124  
0.8585464656713461 0.8547408846730618 0.1196368785944345  
0.0930712465072925 0.0453356561355179 0.1907318667651407  
0.7146894938124388 0.4232246688097677 0.1322440412000293  
0.2361995981711244 0.0445762585436560 0.1592303280658064  
0.5650283982159130 0.4228232492306714 0.1298182322002596  
0.2864321008792916 0.4314021520352019 0.1298743023593706  
0.0088954356147599 0.0036256602953508 0.1418835960047626  
0.1366877786928669 0.0037229570149053 0.1429634310997362  
0.2856897882151628 0.0037171729460880 0.1205009837254492  
0.4256015871043990 -0.0018958877570937 0.1430107083473314  
0.5715688667131694 0.0026393667708502 0.1240041132009477  
0.7133888334469901 -0.0007260065111222 0.1392583861607130  
0.8584588000657478 0.0022874452762524 0.1203735030868322  
0.0012116254165379 0.1392989040686187 0.1255898373464541  
0.2789836603616007 0.1384106511092551 0.1277661505687447  
0.8122332630820893 0.7641682752630434 0.1576727819206801  
0.9510852746990454 0.7606085493863044 0.1376118977297008  
0.1363488949787502 0.1309166572279590 0.1435414607521074  
0.4294513554189566 0.1386634861063524 0.1309276219287202  
0.7146570152640978 0.2888934280410395 0.1330321808995041  
0.5688103047504844 0.2830625655223409 0.1391570015602474  
0.4293933642502927 0.2877843313592827 0.1301080125488611  
0.2850036079756694 0.2805569975006415 0.1213656777875424

0.5648662601064863 0.1395586754257632 0.1313576669204322  
-0.0000373232544694 0.2882285274585248 0.1285370696995878  
0.8511011801945793 0.1398025918560759 0.1281469481862743  
0.7153703383513060 0.1400080172362690 0.1300914049210144  
0.8556204986823114 0.2836783199992082 0.1377416611533301  
0.1376384397231760 0.2808028311825326 0.1206373735803457  
-0.0004255290059664 0.4237550082726009 0.1295244939000394  
0.8078927884093406 0.6178656213465294 0.1628870786548966  
0.4258492941820625 0.4249280794341211 0.1406375528581226  
0.2589932294314822 0.2115261853875454 0.2411744286623938  
0.3740534927516353 0.0453785804632211 0.1622981666541238  
0.6624681415934591 0.0464124872260801 0.1615254644096330  
0.9514491929491656 0.6181027335125160 0.1623966406247327  
0.0937650753449891 0.7654423625772375 0.1573970406442569  
0.2361025825835932 0.7621482659836052 0.1583626181910574  
0.3798065667613289 0.7619514379743363 0.1592377206500799  
0.5233648899296911 0.7606320409982888 0.1632472335065355  
0.6653762843604227 0.7600962518757968 0.1639266138521243  
0.1392640592346162 0.4247206484248471 0.1387852954314957  
0.5728290914868237 0.7173018407070139 0.1288559268294140  
0.6116226753529852 0.6593373100303612 0.2659551526474681  
0.8078252283751908 0.1879784750231140 0.1648198462805727  
0.5211570191734796 0.3311617591694371 0.1660537718791076  
0.1834648624481414 0.6633578254219235 0.2614265947880837  
0.6653583235077738 0.9033537538356282 0.1647568227505168  
0.8079579039183632 0.9031411148013614 0.1361982074139946  
0.9504342507063013 0.9035608888801911 0.1557082545146800  
0.2584500863714682 0.0445871268358127 0.2416018792665539  
0.3485846265366073 0.0441683891694588 0.2440506104105924  
0.5488235368570100 0.0461075008719722 0.2444515400290358  
0.6388601952208123 0.0467251267975018 0.2436162070631479  
0.8379022296016848 0.0464517420398981 0.2405835791688185  
0.9284341083645202 0.0468509601576384 0.2384846868572185  
0.5229982710867329 0.6168413210134311 0.1378166745726670  
0.5244226233236192 0.0458281030625265 0.1626429908941415  
0.3803077490507937 0.6154462164046711 0.1537801274460722  
0.0922212734253807 0.6138620437663931 0.1568940714104435  
0.8121389163318067 0.0461843591375464 0.1589972915048067  
0.9503671891023178 0.0450331028849829 0.1564222805129180  
0.0949864067583862 0.1894488450696324 0.1577005862370827  
0.2360552325556390 0.1895089786210840 0.1589674609962863  
0.3787574787855617 0.1879695132160275 0.1413867254738528  
0.5210850709647314 0.1876981490313112 0.1669669619673830  
0.6647845407828785 0.1890555796844380 0.1428254508360993  
0.4285686568570815 0.7139624752314869 0.1332946317011201  
0.0933230967670883 0.3264623225748075 0.1598796875758888  
0.3773372286296903 0.9015751570073940 0.1680493321295990  
0.2369647527682370 0.9044966204420970 0.1340712161618317  
0.9507978320851425 0.1885531083450679 0.1395592804649581  
0.0953854325275308 0.9037301039346507 0.1563755045206892  
0.6639762408537522 0.3309040256928412 0.1672473806584461  
0.8077946399952012 0.3308025264636894 0.1663976634782778  
0.9514612688395129 0.3314744002760240 0.1646568142721191

0.0932659547541199 0.4766664335637424 0.1611091815338328  
 0.2353435726419695 0.4732778187238223 0.1636947947376379  
 0.3785821080175163 0.4740219141965881 0.1658248642831615  
 0.5247058013236354 0.4765585915837576 0.1604129313486739  
 0.6649577259885483 0.4734560800642812 0.1413878814841560  
 0.8079867833879020 0.4749315088174835 0.1652426130659032  
 0.9492310520846243 0.4733967926443656 0.1405188158644179  
 0.2362657359988517 0.6166635888193626 0.1536465729530929  
 0.2011360561379556 0.6203789431336850 0.4700840904784236  
 0.2713029247946597 0.7203024244685210 0.4765477996765754  
 0.3520747364447565 0.7552272655645503 0.4253905349983641  
 0.3843056162097531 0.6903008398364848 0.4086529900467197  
 0.3171027389754311 0.5929793278548883 0.4295880291340960  
 0.2288239721268255 0.5581989458284811 0.3530847381982686  
 0.1464561081253916 0.6350127441876831 0.4085695820429013  
 0.2226785830060821 0.7334220697157815 0.4111009120192534  
 0.3007112753842383 0.7637385450063006 0.3586091137160311  
 0.3348621368183351 0.6435247606429307 0.3400643142486950  
 0.3113506900204709 0.5483394194979152 0.3514947092238388  
 0.3745455428319450 0.3264692963606263 0.1612108751403088  
 0.2365162848037054 0.3310769056472437 0.1368957249791787

W

0.2675778926479600 0.6564351978220111 0.3984973047254676

#### B' WSi<sub>212</sub>H<sub>49</sub>

Lattice vectors

26.880099999999998 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
 -13.4400000001209996 23.2787999999030006 0.0000000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.000000000000000

Fractional coordinates

H

0.0143848262159104 0.0073897561127097 0.0882619535957393  
 0.4261407955494339 0.0001479088465374 0.0846314540149510  
 0.5672572781347992 0.0076874462318229 0.0654547864335819  
 0.7168180803237442 0.9971284038555664 0.0813911893384035  
 0.8623687295435152 0.0114981404718566 0.0674566040937624  
 0.0079187700263717 0.1350302272651764 0.0730003134232521  
 0.1332053243031472 0.1270158914393553 0.0905912531956012  
 0.2684185835876382 0.1341028356067202 0.0728748598870361  
 0.4421251742288291 0.1354074772712073 0.0768033824440126  
 0.1344401300705483 0.0072628370992907 0.0887067688328972  
 0.2912245131829168 0.0119071896648632 0.0683714493539020  
 0.4250344653675054 0.4255581081923738 0.0867481404359488  
 0.0064308945511707 0.3073171430528010 0.0800383929633264  
 0.1271365441417150 0.2783504344796455 0.0714789784868988  
 0.2895709081582459 0.2784372649955920 0.0699541182371901  
 0.4401230426138577 0.3051577217683449 0.0770179170297989  
 0.5545986442030091 0.2747554551886516 0.0820687018603533  
 0.7206989502286688 0.2926966347832946 0.0737503676425012  
 0.8662084267302110 0.2833566648955438 0.0819179934402154

0.0044771655801458 0.4127135323182812 0.0809290973390609  
 0.7211509708643580 0.1437735765308227 0.0754076699987499  
 0.8381682439429776 0.1332870379606871 0.0729251126408419  
 0.5553553771125146 0.1393809681576267 0.0777012165185520  
 0.2926386917884022 0.4473277050939241 0.0810170429885378  
 0.1383272832098269 0.4243996721907854 0.0892558366589985  
 0.5495288791304118 0.4138289770957059 0.0770839182492727  
 0.4251369548479013 0.7098669310673817 0.0860820423303369  
 0.1276127241561350 0.5609587029087613 0.0726248192980947  
 0.2917519490984590 0.5574484302374163 0.0809574189737521  
 0.4055654317069578 0.5584978472813149 0.0801720301930769  
 0.5742263745074068 0.5635417970887312 0.0700306886353473  
 0.7234179517204791 0.5894523226366689 0.0752807581692847  
 0.8571058701643204 0.5721038741144607 0.0832352349970648  
 0.0048939788315020 0.7011787846461771 0.0751054112827791  
 0.2921090022934273 0.7292577862617060 0.0786584838218634  
 0.8424035181838255 0.4263548267531017 0.0748004608407384  
 0.7290368954310485 0.4302869420612820 0.0724704856589420  
 0.0063600705095709 0.5871434582078582 0.0770409928491787  
 0.1396710541386951 0.7103375163036969 0.0858158699667855  
 0.8386949377878201 0.7019893432264925 0.0744363250615398  
 0.0061281155842572 0.8701910815270316 0.0715148228445742  
 0.1287201729752625 0.8488623009658147 0.0673938298132193  
 0.2937375083977137 0.8438022347522306 0.0776270909711705  
 0.4059123067349523 0.8441432892815651 0.0776005975194734  
 0.5784393909955996 0.8444826820870127 0.0770515655857867  
 0.6917066161623491 0.8441208719240327 0.0765669701439753  
 0.8620673041233647 0.8493744397930246 0.0667782478395623  
 0.5785332796513806 0.7307156359540748 0.0779211063209589  
 0.7130653519531006 0.7126422850343849 0.0843533031523522

Si

0.8587286696377968 0.2840011313624980 0.1350662114284537  
 0.7137921417340799 0.1420234632238765 0.1286492173140421  
 0.8524524231207052 0.1394427028353869 0.1253939293711918  
 0.9995976255233685 0.2889092609554400 0.1313752232564755  
 0.7149878216277608 0.2876877035716977 0.1271303646776781  
 0.2846053070884936 0.2808212665789537 0.1232648454627355  
 0.4298324856970971 0.2886824983020812 0.1288282787358054  
 0.5658614025251193 0.2821964065467735 0.1347642516433491  
 0.1363208275778164 0.2808363195794159 0.1245257276396284  
 0.5660086027677091 0.1412362694002951 0.1305210080106875  
 0.9989060875456226 0.4226388653511255 0.1330120531055498  
 0.9519330846531502 0.6184896705537029 0.1643768200179921  
 0.4256977926581765 0.4253408196090573 0.1406685008364008  
 0.2610540913890785 0.2105326919692825 0.2412567528536162  
 0.3755272476990675 0.0469947974789551 0.1601247177343229  
 0.6609805020525850 0.0448375959254364 0.1525375030832905  
 0.0936196304167632 0.7644743989853244 0.1587811140786457  
 0.2364113239055583 0.7602835241249064 0.1651603230546294  
 0.3784118208497583 0.7600274520354550 0.1657981431536570  
 0.5225020224229202 0.7604058613235525 0.1653305432237153  
 0.6650658058823365 0.7605185895722751 0.1643099587934134

0.1394867327771191 0.4247732504388239 0.1431707275865768  
0.8075987026162327 0.6185139059825790 0.1634421311051552  
0.4298942008634445 0.1403226288796538 0.1284358461780756  
0.8514687322423502 0.7100560081487973 0.1270500692333272  
0.9511473620877993 0.7607175817518782 0.1385859306539936  
0.5718225745973070 0.7173524443379291 0.1304967901353390  
0.0010402218583301 0.8603210369322122 0.1246743009162978  
0.1378248401170029 0.8548798394466415 0.1204803418856655  
0.2864402569413410 0.8525631670321122 0.1296843740622308  
0.4205329789141876 0.8518579023274104 0.1299364903912208  
0.5717864295914790 0.8523499720008577 0.1294028376875761  
0.7073601473069854 0.8526678423098754 0.1287091696412059  
0.8585829875932366 0.8549023796618760 0.1199123503980393  
0.0932006691852769 0.0451140729152661 0.1908192979750551  
0.7172943083866610 0.4291968522782231 0.1249604102237509  
0.2367736293951402 0.0460094531330579 0.1578077949291680  
0.5649624306595212 0.4237023020893513 0.1292294983639753  
0.2856478412568821 0.4314448987350622 0.1331238181561684  
0.0087441815890237 0.0042281147706869 0.1420826460183051  
0.1368643069876211 0.0040766908537744 0.1424814066016049  
0.2854495592474932 0.0030223301369729 0.1214878485926776  
0.4259843826313538 0.9993315234051227 0.1385566180033191  
0.5680888974857250 0.0011536219463935 0.1187611698813807  
0.7142304022973386 0.9984134515365245 0.1351880217136170  
0.8589788008702738 0.0028633954725798 0.1206317233416457  
0.0009459092288484 0.1400734683215797 0.1258191565489148  
0.2805473334428731 0.1398047775582574 0.1256830897110446  
0.8122596199880302 0.7644582463184905 0.1581614399978644  
0.1363053166061186 0.1316055508789851 0.1444429946367662  
0.6115497836908045 0.6597464586250809 0.2663857690156388  
0.0922575917748710 0.3263906478317003 0.1639731706469138  
0.5213964761937557 0.3318559912954503 0.1657625096432994  
0.6643159624285462 0.3339658822244967 0.1522341886947565  
0.8104354119506517 0.3330562661760969 0.1570000491381865  
0.9508417719663546 0.3309255696418262 0.1699794335056790  
0.0925928974565415 0.4762399968385828 0.1639906883871242  
0.2355026578287286 0.4734425715451748 0.1686730902934887  
0.3785106039604216 0.4736553588125496 0.1673437297692252  
0.5244028681878553 0.4768035457576568 0.1607877333077527  
0.6649901862280007 0.4757057639174064 0.1392971803328074  
0.8080245963383510 0.4753147746732236 0.1637502920082029  
0.9512180205634256 0.4748883612592283 0.1423513858204124  
0.2358432360388011 0.6164404167497736 0.1414233841146019  
0.5902770432601286 0.1695905220521347 0.4340486329804537  
0.6423282092652790 0.2714573997436210 0.4305744811358138  
0.7422034295493732 0.3331687237995954 0.4116241918883563  
0.8031254872210546 0.2960192293548227 0.4292065493910057  
0.7597692440454527 0.2095601868954188 0.4734872536929063  
0.6719896594900386 0.0949643792395522 0.4067879340412883  
0.6066527812083569 0.1854380894004535 0.3488547192258787  
0.6026886511548383 0.2708407326515960 0.3507704991901878  
0.6975377447887641 0.2932165565204493 0.3401556194534062  
0.8063384330017422 0.2511813180157735 0.3570061246229163

0.7711372045079915 0.1676887605922883 0.4022007685375357  
0.3751337150463712 0.3268451117921948 0.1613916767884092  
0.0950057172558931 0.9040103061262663 0.1563389071082559  
0.8081723612674495 0.1874185127377870 0.1602460073180090  
0.9511057469871709 0.1893593631955802 0.1404168225911327  
0.3790975905094832 0.9032696962905478 0.1642048500946112  
0.1896421868300938 0.6598339576517025 0.2679489203174087  
0.6650992056201833 0.9031866301819121 0.1629375748440983  
0.8081691005523901 0.9035996749124312 0.1358744029171615  
0.9505566771322668 0.9040456711194742 0.1559849215738530  
0.2613823390268482 0.0488498027247995 0.2397977801733999  
0.3514248986915800 0.0483547166987507 0.2418452852153238  
0.5489213497991343 0.0457711197659454 0.2415400865530571  
0.6373797706490058 0.0428546094238329 0.2347809138433131  
0.8382264776634077 0.0475437520089382 0.2405821240399779  
0.9291351524282337 0.0484265948210069 0.2393417386515312  
0.5211581886844777 0.6170148462518508 0.1400976756296980  
0.5242330716294783 0.0466043068019813 0.1597643819604624  
0.3782289811329480 0.6159932461817540 0.1677366162214754  
0.0932982304313777 0.6145303893577122 0.1621512427166447  
0.8122491343415126 0.0466073258301399 0.1586952250506090  
0.9505661249315124 0.0459363776821908 0.1572765411395065  
0.0937152375239559 0.1889040318410213 0.1600799835001696  
0.2364645528829384 0.1889654251202689 0.1591314535144562  
0.3797662699509293 0.1893693810354448 0.1401064432133473  
0.5208323980580675 0.1880428210892929 0.1652031629906848  
0.6642455363559230 0.1904662907910997 0.1492480311501436  
0.4260859246892891 0.7115339935054286 0.1398992794428445  
0.7133841238106573 0.7131856320419299 0.1381653049132943  
0.2368460394095745 0.9036963195694642 0.1365490229740726  
0.2858650451763993 0.7166300414812279 0.1313489430244680  
0.8626325436076485 0.7200591226013752 0.2670749279794478  
0.0000928965025833 0.7098796084638912 0.1275888607702392  
0.0909671347921674 0.3002130043567100 0.2454697900762596  
0.2357773609227511 0.3308011522083172 0.2234715569381841  
0.3516241443093352 0.3010191505483866 0.2432688436007307  
0.5195173936141619 0.3321464540591212 0.2520055230414335  
0.6640084558406927 0.3365739344876187 0.2368625142708605  
0.8142676358601271 0.3355486405773234 0.2425154787675720  
0.9526705880075896 0.3298015417313358 0.2565887417804825  
0.0923700569752007 0.5007618394088338 0.2456707593939632  
0.2389904866295042 0.4744324362952548 0.2537261341860998  
0.3767833587905096 0.4744826326528698 0.2524623882728633  
0.5497572035071421 0.5008943321673527 0.2425838199130007  
0.6665711487731487 0.4766511197685679 0.2237642437286841  
0.8119489061626811 0.4827751735614099 0.2496439728780096  
0.9520905589822881 0.4764462774053607 0.2267544216575880  
0.0926809470851920 0.5908386965233794 0.2443617335459389  
0.2365142370288048 0.6167330425442947 0.2252642633934401  
0.3747541961456304 0.6084043228169416 0.2529244309012020  
0.5213264244420184 0.6170292686312873 0.2238736755235819  
0.6393132989218786 0.5908408363309070 0.2420097605319389  
0.8092249246611884 0.6185249480230128 0.2491904754930468

0.0931484722116660 0.7898587456014845 0.2403319218951375  
0.9957687919981750 0.2706852810683840 0.2753683542335714  
0.9506296734982508 0.6183224101068638 0.2500953392961107  
0.6665229736763146 0.1922443046677914 0.2345770015240926  
0.1405497788209848 0.7124054315422550 0.1395791682160571  
0.1877124145133233 0.3711412459225443 0.2680825027418992  
0.2394401931421829 0.7625930253749619 0.2501831366077345  
0.8085005138825566 0.9029489065612792 0.2197911679721085  
0.5309208503738465 0.7641143306880246 0.2503875265794260  
0.6646164869115224 0.7625301130034751 0.2493531384957133  
0.8381729875402835 0.7896319114267817 0.2397983945845137  
0.5210898202632717 0.9007369522610511 0.2211349434278685  
0.0933615718727114 0.8802557444465631 0.2383259757710539  
0.2364841488131705 0.9033954635176779 0.2204748952263575  
0.3767689498427186 0.9000512989651646 0.2493043971044926  
0.9509338429693148 0.7599358753004368 0.2229366931703524  
0.3747332652964016 0.7641535776042455 0.2509686634673056  
0.9284088595169514 0.8800606628136091 0.2380320789717056  
0.9926432024004704 0.1450995360667230 0.2710602741822981  
0.2941290401965861 0.1459661769667286 0.2699578767459209  
0.4171525132553220 0.1423623305527036 0.2724473013496992  
0.5727818430543037 0.1400743729408508 0.2719328107467351  
0.7086802465727898 0.1357993672127651 0.2613021572529138  
0.1910381920073279 0.2400737870411515 0.2660198357646900  
0.4184878571250595 0.2735090745502109 0.2729024704013208  
0.5709660017702076 0.2834250617179458 0.2742594940107370  
0.7161094984040883 0.2908181612782472 0.2598433893803886  
0.8503992944619229 0.2777556172422485 0.2773576928023211  
0.6651771469968878 0.8997017916100289 0.2480977852104616  
0.8669507727416557 0.1411029135524884 0.2723486284809121  
0.9506487649888535 0.1891715129444770 0.2247354190340316  
0.5210631818210607 0.9023652231855632 0.1373362487351197  
0.8562025743508728 0.5710379695138686 0.1370073926242414  
0.6861676660557255 0.1484963409973960 0.3373842421403984  
0.2355655374575914 0.3307963006598836 0.1395603673904540  
0.9989756545726787 0.7200552611796067 0.2674721067261565  
0.1887236675630450 0.8148442301965463 0.2645485088719102  
0.3301159192025923 0.8100945698481953 0.2922835656919653  
0.4769082908807719 0.8120411115505018 0.2648010577350868  
0.6215355610859451 0.8099609066935388 0.2915146651414300  
0.7674922279077383 0.8144322526443619 0.2639421339662208  
0.9957979336100001 0.8500215121096796 0.2660953992520338  
0.1922952565067545 0.9491584056114897 0.2637726091807851  
0.5164561825621841 0.1841692580728197 0.2496798520540933  
0.6112931476697079 0.9485421978306181 0.2634680512816321  
0.3811175784100553 0.1899602246548532 0.2245890423422807  
0.6622155315991018 0.6151142534944731 0.1599133069128979  
0.0907763081091777 0.2094985027639719 0.2424121104650817  
0.8525367370801753 0.4277307736589853 0.1276475048961631  
0.0003454718616275 0.5742268218743588 0.1296045889304670  
0.1368995473610906 0.5666699691118323 0.1256120433797818  
0.2856174373799927 0.5657720952507008 0.1333262341575833  
0.4205037636210517 0.5661906301660834 0.1324616191768094

0.5706971794776365 0.5678083926969375 0.1232297692529397  
 0.7153964988471359 0.5752766551381445 0.1276461715908136  
 0.8097761045147116 0.1819816402370423 0.2453589423233707  
 0.5790256818541658 0.4342716126773824 0.2696669658020301  
 0.6591821072003506 0.1500914792412026 0.4683452947296877  
 0.3768704118651368 0.1872292216641512 0.3264166159697492  
 0.4770164223682973 0.6623762347416344 0.2664544565274134  
 0.3254705305684881 0.9518371532211126 0.2642174361972129  
 0.9504847546247698 0.1845477723362276 0.3299898347000443  
 0.2358075407944240 0.3287241344689725 0.3107477936935350  
 0.6668992875123814 0.4753552296182995 0.3174105050973175  
 0.9495802350083232 0.4762780586981640 0.3201887851964353  
 0.2373750622305379 0.6186943562376316 0.3131140756164350  
 0.5228099118600750 0.6181576933452601 0.3115415889720045  
 0.9516996114578580 0.7622753484188766 0.3128477570299846  
 0.2359879294869563 0.9042876003765027 0.3088643038482377  
 0.5231445538748580 0.9028622406055151 0.3094242333326723  
 0.8095743085561182 0.9038790317995706 0.3079337640478940  
 0.8983560262693371 0.9488651748134413 0.2632920543253903  
 0.3252919316430207 0.3711769352159514 0.2665895087659876  
 0.7678311210097208 0.9513012864137775 0.2632916547108349  
 0.4800342000943584 0.9489237579615182 0.2650785717692511  
 0.7111923438967842 0.4330340749258625 0.2661973956651180  
 0.8632736890539556 0.4334827112267313 0.2687723389959700  
 0.9959761162277543 0.4334679723664205 0.2732249770568951  
 0.1895377541168352 0.5283162724407870 0.2697020965893742  
 0.3301562790413906 0.5184064174154969 0.2951985359210248  
 0.4803155958843091 0.5280797440862544 0.2676147457443969  
 0.7075943459309036 0.5637578444303297 0.2687948108840873  
 0.8576309726167101 0.5744984547783449 0.2881316310144142  
 0.9976203308399845 0.5641238598178149 0.2710738969415392  
 0.3266116914156286 0.6624030307375228 0.2669970776124775

W

0.7009233888837236 0.2178079005934016 0.3960857501905697

#### Site A WSi<sub>212</sub>H<sub>49</sub>

Lattice vectors

26.880099999999998 0.0000000000000000 0.000000000000  
 -13.439999999999999 23.2788000000000004 0.000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.000000000000

Fractional coordinates

H

0.0155652517085456 0.0079691679128506 0.0870357700501629  
 0.2841884801987727 -0.0048846080216842 0.0707723815435844  
 0.4306288187896005 0.0048976812655701 0.0825319790835603  
 0.5783787863695670 0.0123216789887209 0.0684993080178811  
 0.7150555707780414 -0.0000448622645555 0.0843981598401785  
 0.8631783801049037 0.0128033952665491 0.0668093188915266  
 0.0070824196456860 0.1357422740000841 0.0709627713186170  
 0.1348808598908199 0.1272812592650966 0.0870166690328659

0.2720840298966965 0.1371090023000311 0.0698084670157527  
0.4405285938719796 0.1369343082262512 0.0738953744416065  
0.1348961345902727 0.0080446990492931 0.0868102529928863  
0.1429066208270206 0.4278358053016605 0.0843922796190612  
0.8394756194113794 0.1364319671698365 0.0746611746208609  
0.0064364591228134 0.3034105506247750 0.0746509663076132  
0.1300575120292935 0.2797185071322518 0.0667818586768341  
0.2926684480980509 0.2802714878060799 0.0664427292434772  
0.4409761555639495 0.3047109399918070 0.0742365179384018  
0.5714047410041390 0.2859822020458856 0.0828987709897184  
0.7244891930061111 0.3051644806844408 0.0789461150182347  
0.8573521098414053 0.2855463569314092 0.0831371042364848  
0.0051769263602145 0.4177310040073623 0.0752746228579748  
0.7251898375950671 0.1376979611286276 0.0752695596973104  
0.4291292536165105 0.4292031184856152 0.0843968421941006  
0.2971135386595913 0.4508248243473242 0.0780286831711480  
0.5563351646517453 0.1379713757328080 0.0751116731339218  
0.5557646920570314 0.4184043254652277 0.0755333222936109  
0.1380111706820513 0.7122344983562080 0.0825879258848007  
0.0049268095052569 0.5865857270972615 0.0751619493319404  
0.1305089969560619 0.5645197427128325 0.0685411456360328  
0.2965896912313440 0.5607955032379209 0.0785119964379014  
0.4094442006724959 0.5618705416356351 0.0787259384002500  
0.5773955715548728 0.5655490933970974 0.0693527001130150  
0.7245454769502039 0.5871784087621293 0.0755662481139417  
0.8569386950253358 0.5715291019024474 0.0829359831137567  
0.0059085325123598 0.7023582819560091 0.0739971709956727  
0.2984991082582323 0.7334989403653189 0.0767883493686139  
0.4282462800177261 0.7146504668268775 0.0865810734286073  
0.8377540207313841 0.4184437472529076 0.0789504618546980  
0.7240470207341125 0.4188940122554576 0.0788253142687932  
0.7137063045592913 0.7137756903268552 0.0844223029868356  
0.8381980821680804 0.7019229963559240 0.0743148035858717  
0.0055741617791769 0.8706711620140456 0.0698357223805028  
0.1476969853787169 0.8585273829280896 0.0707831047000117  
0.2879493721999602 0.8547641379744884 0.0786146307237461  
0.4094134728678666 0.8442901221024540 0.0767121241425802  
0.5820868084816290 0.8462809933435169 0.0785015981363976  
0.6920752540348689 0.8457606667002059 0.0780534832596753  
0.8626224134349475 0.8502252714394870 0.0664883494326222  
0.5810499357327622 0.7334720674922666 0.0787354039431304

Si

0.7173870449614370 0.2914000172002024 0.1314724009771390  
0.5711827974084290 0.2855701306750350 0.1366815974128522  
0.4319810186710513 0.2906452236898911 0.1266579127499796  
0.2868386387963293 0.2832274893965210 0.1196096161272236  
0.5678288547363602 0.1421181352414218 0.1279831058413589  
0.0014891382302661 0.2900325348534661 0.1272031224830036  
0.8528503231767129 0.1413863761223003 0.1272123328674798  
0.7176255312402654 0.1418859480565873 0.1280983139433571  
0.8574414222335836 0.2854418850919063 0.1369216101674635  
0.1392289538065283 0.2829878722634715 0.1199188351875889  
0.0010059462706176 0.4252670265953249 0.1281093498965327

0.8094683276283047 0.6196821373515811 0.1637733297140363  
0.4284020063977360 0.4280775416348123 0.1382237481675171  
0.2617683657078492 0.2136418404834658 0.2371044256784281  
0.3769826811272576 0.0483817791545956 0.1578169524175228  
0.6645488124323049 0.0478772747389799 0.1589448217114528  
0.9532492058928510 0.6198283777292822 0.1633727665726921  
0.0945166896517740 0.7658776632622094 0.1578974519311405  
0.2373137023778907 0.7611559742642608 0.1603260996619974  
0.3803388252966190 0.7625558825590887 0.1658568185337884  
0.5247553458530568 0.7623747711879357 0.1665323901754097  
0.6668621342128327 0.7619452763870160 0.1652158579941267  
0.1426382615243700 0.4275443794163747 0.1382343211095584  
0.4316215616230946 0.1416657557741746 0.1263800971979196  
0.5739591249488349 0.7194534639267630 0.1311922894573730  
0.1378901447205835 0.1327918884525724 0.1408351801784772  
0.8135081558762698 0.7656786247351896 0.1579951388400523  
0.7147969897474854 0.7144916071963249 0.1382490785042320  
0.8522121328784188 0.7108897532923790 0.1267438949058121  
0.0016270913557809 0.8610008684357431 0.1229679194159472  
0.1438131679649899 0.8584557813358796 0.1244030321661037  
0.2861291302586468 0.8567053279574416 0.1322865541820484  
0.4241127502320572 0.8540347739094313 0.1289922662650980  
0.5744415079125842 0.8542339819715383 0.1306512335242288  
0.7088443510686910 0.8542772234935629 0.1299671960696618  
0.8596437723325367 0.8560514889206402 0.1196536958129595  
0.0953541264613107 0.0475497167984155 0.1885819117182463  
0.7172308917133280 0.4256654149199603 0.1313921705679163  
0.2380672013441684 0.0472823333094535 0.1543733444474384  
0.5675312622364057 0.4255626985713258 0.1283710317276750  
0.2886055033309757 0.4340363267863825 0.1299397619026193  
0.0101008211484475 0.0050078602059250 0.1408598725435450  
0.1378023138634928 0.0050948641581329 0.1405614349569822  
0.2843615592182218 -0.0009656914417088 0.1243940352949696  
0.4290102201024719 0.0021112444561984 0.1362961405866946  
0.5734674016280538 0.0031264768888017 0.1216482427775991  
0.7153383602774136 0.0002290670443977 0.1382380810597971  
0.8598916231307703 0.0036510854964317 0.1199499946445435  
0.0022020881541707 0.1406726824365087 0.1240834494647285  
0.2818849234441992 0.1412127876583469 0.1229294272540491  
0.9518748637972734 0.7615620679970739 0.1377597748271235  
0.8096068389005769 0.1896178002327829 0.1637909535207565  
0.2377724523994441 0.9050787165546941 0.1556915184567167  
0.5231894432121528 0.3333973827960063 0.1637140298256775  
0.6660942526941375 0.3328964778889210 0.1654648890466622  
0.8099924648318886 0.3328879849154178 0.1657451996308025  
0.9532608000608289 0.3332787392378351 0.1637911428001821  
0.0949979203127830 0.4783355992885277 0.1589689451556996  
0.2380876832462866 0.4757742796184302 0.1651858604962828  
0.3809390390543221 0.4760053511125396 0.1651908603947536  
0.5266635819612574 0.4785753131579525 0.1595062802894854  
0.6672186106550251 0.4756614361985705 0.1406738519656229  
0.8099802001588730 0.4767887302799361 0.1654907858147491  
0.9514454573744936 0.4754203776343625 0.1405239668541164

0.2385994847917887 0.6186547072325359 0.1390072204564581  
0.1473033108271507 0.8451719003048703 0.4593858902902377  
0.2050398684498855 0.9391337017822899 0.4901447618247362  
0.2987099728498013 -0.0033040538755493 0.4588294767896995  
0.3501640278638148 0.9539967000004210 0.4288168385061042  
0.2918231818899928 0.8518904440066218 0.4335827745085748  
0.2159381404864271 0.8254645365881985 0.3503334193889244  
0.1127125407078867 0.8768146824439768 0.3919134198893006  
0.1727605916375324 0.9707310864406673 0.4238453683447404  
0.2664027278498084 0.0305826602665876 0.3913190643497672  
0.3177277492772188 0.9271746860555035 0.3501352110980641  
0.3074529061583765 0.8356279878431492 0.3509687457791207  
0.3772160863187973 0.3293614007776909 0.1579508064505599  
0.0955854974914933 0.9048059252182371 0.1543406395455305  
0.2382069038977318 0.3334345093530494 0.1363914136169659  
0.9524816871657493 0.1903977175060238 0.1386309848245816  
0.3817299634431652 0.9055593185097442 0.1602127365040182  
0.5242226808493138 0.9042722296329131 0.1389771404919252  
0.6670910572914407 0.9047902576741508 0.1651990462517616  
0.8094377491261563 0.9046798603465875 0.1364154177923028  
0.9517966090958431 0.9049703334023539 0.1551674268988478  
0.2616223140330361 0.0507962578139511 0.2366185190609985  
0.3531619096842437 0.0506726219366086 0.2396630062873260  
0.5514979181389645 0.0486189490337850 0.2406059571298372  
0.6408800559664329 0.0482438927742681 0.2409150326953617  
0.8396195407157003 0.0483131072767591 0.2400856339630942  
0.9300148197859280 0.0485293947794983 0.2377544852764738  
0.5237193050311347 0.6191739570109797 0.1399714926606858  
0.5270390198673907 0.0480393668452196 0.1586345714059698  
0.3805163122003954 0.6181258629359774 0.1665315667887461  
0.0948346899225205 0.6158233106413777 0.1586921678903035  
0.8139441673518122 0.0478828698462293 0.1584714295494587  
0.9519135769016416 0.0466785940597630 0.1557034668062834  
0.0962091219802651 0.1909689731263950 0.1556750922307703  
0.2379250129859901 0.1910702504072790 0.1551158878724402  
0.3813165240443484 0.1909905445063876 0.1377435833575995  
0.5230315578053043 0.1896161397391750 0.1632953859160254  
0.6674660632582720 0.1914422835920190 0.1404973420715672  
0.4286397062500678 0.7142539139949334 0.1404202448746282  
0.0950008034370488 0.3289330856911146 0.1584520738584444  
0.2888128036167368 0.7187544735524442 0.1290593984707102  
0.6133086622728510 0.6611895582968145 0.2667928536344329  
0.0012059604199572 0.7112419670980515 0.1264936712778612  
0.8113042526291427 0.1914699480907955 0.2496363900840523  
0.9519355437687821 0.1909415715942834 0.2229499939826180  
0.0945536165958603 0.3032466337215894 0.2400677958502213  
0.2377795409458184 0.3327867457499142 0.2201221468434213  
0.3519692529098303 0.3039659375097355 0.2396009596119630  
0.5233014387555918 0.3318128116009362 0.2496024470305669  
0.6595777913479384 0.3297144590730839 0.2513903123031492  
0.8132709229603550 0.3296144145325695 0.2516889015558613  
0.9514032880987799 0.3315793008056186 0.2496361782738542  
0.0946409710290761 0.5019983739577191 0.2409429405658949

0.2404910623855358 0.4760033069647220 0.2501748514307366  
0.3785567377297238 0.4763471318222295 0.2501813408711316  
0.5509203424293622 0.5023340032769877 0.2414774003121702  
0.6674989984824240 0.4753973193936785 0.2246555404663657  
0.8131599340319847 0.4833003289789387 0.2514292349621627  
0.9507188973878909 0.4752235124306070 0.2244613898156176  
0.0942892755188353 0.5913854271262724 0.2406689068006856  
0.2386241906222136 0.6179186204427299 0.2225984516118311  
0.3767194597730123 0.6102398035860920 0.2516217088315487  
0.5237057360021846 0.6191635093822175 0.2233034126156727  
0.6405217834006237 0.5919518326119555 0.2414942906206045  
0.8110423662811516 0.6195525039753705 0.2496765204153492  
0.0922593165207598 0.7897406087129148 0.2397540711241552  
0.0003851583615394 0.2787691199646069 0.2675573495274636  
0.1901145500143251 0.3731725716269819 0.2645444645354249  
0.9510547286112858 0.6192612522519152 0.2492832221584371  
0.2332804625666950 0.7589867984288657 0.2445099170942286  
0.5249711262718961 0.9042538492875661 0.2226469980069399  
0.3838791352615282 0.9095878466192384 0.2443901620070416  
0.2381950648068807 0.9046561917627998 0.2406242332715815  
0.0921007889679848 0.8812567708370598 0.2365982280368727  
0.3791869983929392 0.7636401033381666 0.2513087350676382  
0.8388967313677732 0.7909265106183123 0.2396564506079036  
0.6665245751477331 0.7643262062813000 0.2502057211668797  
0.5326534370354619 0.7661358229715236 0.2516264658492760  
0.8100890970072112 0.9050912632271672 0.2201481074041360  
0.9506378115739564 0.7604515419870573 0.2220775232360377  
0.9292187591907189 0.8811206340334677 0.2371602373758429  
0.8641091270670618 0.1424829623516568 0.2675587799691674  
0.2923568070289290 0.1472889603771132 0.2650720216602551  
0.4219587351659576 0.1442861017343199 0.2666282394458097  
0.5778005274840847 0.1438105980917092 0.2678973501565019  
0.7092039611973060 0.1438019703755992 0.2678803378989165  
0.9970771849259976 0.1458234452227115 0.2660259034540285  
0.1930588978487539 0.2430843033409411 0.2634449631614957  
0.4214113265232508 0.2793207048147757 0.2671709243426328  
0.5672533297073408 0.2835650259659251 0.2895798397761405  
0.7119894274572776 0.2808419458032416 0.2683536320206157  
0.8594864267292633 0.2833912358053631 0.2898827936558665  
0.6668935100175476 0.9023655799186999 0.2501937708129611  
0.6676631067891478 0.1921488516449530 0.2244375070643889  
0.1407766841192054 0.7138524609907340 0.1363563469733253  
0.3345925949566605 0.9593858340294817 0.2701717880515763  
0.3788645342525023 0.1896062172724279 0.3131855330022578  
0.1897130270140211 0.7935037757250069 0.4292435709688944  
0.8635307702094940 0.7214606038106383 0.2671905779983633  
-0.0014138152320765 0.7209013571832400 0.2666333464567878  
0.1835319114727913 0.8083285133559664 0.2703740062811107  
0.3299430764020939 0.8129798848442420 0.2751498192989207  
0.4810267119905099 0.8163825716604854 0.2670971088822144  
0.6234328701037825 0.8116873265692133 0.2925807113791782  
0.7693943366815531 0.8167853009145498 0.2643964995071426  
0.9956038270132938 0.8505454957280755 0.2650613954927546

0.1883690038281657 0.9544979923128165 0.2640637935470914  
 0.5235923092618771 0.1918052826213974 0.2491954116876745  
 0.6134001455297171 0.9517555703944555 0.2663484357762466  
 0.3824203276801918 0.1922277183340946 0.2220396232012192  
 0.6643088870884667 0.6162242153517574 0.1595212717751883  
 0.0943684385190183 0.2128689076243288 0.2377265415184909  
 0.8514900373465691 0.4255100533615526 0.1314833922646868  
 0.0007741531911218 0.5750628771088186 0.1280322920966017  
 0.1397591644353892 0.5694189751101015 0.1216752205797994  
 0.2886386402488664 0.5684499519640411 0.1306539976828163  
 0.4234409946992937 0.5689296973205636 0.1311844669145497  
 0.5731342450246437 0.5697583246979840 0.1225512952762344  
 0.7173230389980169 0.5753550469997153 0.1283979736158535  
 0.8573066189311584 0.5717045533662565 0.1367228413813881  
 0.4788535829477764 0.6640047238840989 0.2663016730378916  
 0.5778842910872189 0.4337348466585820 0.2682725839381281  
 0.3264153585164128 0.6618054391331719 0.2671009250594601  
 0.9990746152209040 0.5650739068597698 0.2679578665524153  
 0.6668418979527775 0.1904083715394765 0.3134178693026440  
 0.9533624094637523 0.1895254098533484 0.3136160419961458  
 0.2370534584530925 0.3308746586812095 0.3100745269106359  
 0.6668959579402695 0.4759362140416242 0.3137980543251956  
 0.9524508183866071 0.4760042196605241 0.3134310493462616  
 0.2370211054195920 0.6176203906323743 0.3146527773906814  
 0.5239973742680423 0.6188564861947522 0.3119521439849046  
 0.9532613634497459 0.7640047392145267 0.3131044243954969  
 0.1996600389706034 0.9431165886999452 0.3452310327735336  
 0.5252281339564346 0.9058645529965523 0.3143893583939001  
 0.8119927257405712 0.9058329108377386 0.3101195152714596  
 0.8997739873955167 0.9498304162840148 0.2634763669640579  
 0.3261061838366153 0.3734728862099848 0.2643577631757543  
 0.7697042131460677 0.9527484619648614 0.2645721603904868  
 0.4843021615115171 0.9521752857192871 0.2659915900779691  
 0.7119511312871166 0.4309124110294570 0.2682508606430399  
 0.8620251334351560 0.4308829822053726 0.2683771740652159  
 0.9990682339424093 0.4336637508923828 0.2679007170856136  
 0.1911430978230170 0.5295353537296954 0.2663699461107973  
 0.3311853482814319 0.5194368293585551 0.2925560808445261  
 0.4816868262216410 0.5295508196375911 0.2667785710683790  
 0.7091090330219145 0.5649798596666075 0.2683026539438337  
 0.8592923952285768 0.5756064814152487 0.2896696632835353  
 0.1907487613502521 0.6585398071431314 0.2660511939193672  
 W  
 0.2342511540153558 0.9093006457264099 0.4074807596801022

#### Site A' WSi<sub>212</sub>H<sub>49</sub>

##### Lattice vectors

26.880099999999998 0.0000000000000000 0.000000000000  
 -13.439999999999999 23.2788000000000004 0.000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.000000000000

##### Fractional coordinates

## H

0.0148012887643814 0.0070514790175211 0.0863519301064041  
 0.2923845324475078 0.0127322853412197 0.0665712071156183  
 0.4279130613865174 0.0002710738472976 0.0839915178769391  
 0.5764401006889716 0.0111835488044320 0.0683101340862658  
 0.7149628030796477 0.0004099885097321 0.0840732263511464  
 0.8624745943228739 0.0126522678215415 0.0660416082295555  
 -0.0009963763673278 0.1436098993726902 0.0755826771435000  
 0.1358874203697356 0.1279717921817863 0.0863575648154334  
 0.2718308292716266 0.1359179450265260 0.0707338235711727  
 0.4403945403617367 0.1368176180876618 0.0744807767708657  
 0.1353654453526697 0.0074517470310238 0.0866722481064737  
 0.1424418927840471 0.4279631905840731 0.0841955756547861  
 0.8553800596637838 0.1421815652743882 0.0766590582764608  
 0.0006438904263102 0.2876250561298030 0.0767339303419800  
 0.1302572626837492 0.2806614808613436 0.0660916167198962  
 0.2929840939674012 0.2798085985459836 0.0665462866753939  
 0.4409424345843291 0.3038196121233414 0.0745382813874388  
 0.5717244894393620 0.2860595839735566 0.0835838886204097  
 0.7252813188091319 0.3071072411010746 0.0796234990164125  
 0.8551098379151906 0.2879627689849001 0.0806446323148119  
 0.0078163948549713 0.4214011648967307 0.0729005925265512  
 0.7212205449998096 0.1349893074307972 0.0727640806923191  
 0.4290811023003389 0.4286910315153008 0.0843916190778768  
 0.2971498745846043 0.4509184631234972 0.0774934015229170  
 0.5541625890205994 0.1374128421726356 0.0750173098222498  
 0.5556876482752990 0.4182726804596673 0.0758572283141161  
 0.1424936491849426 0.7148245975842246 0.0840284792152798  
 0.0054617182065055 0.5887130078832480 0.0750304789286535  
 0.1316109545974861 0.5663104573883203 0.0683938297717195  
 0.2952561555038608 0.5619282856968024 0.0778327997613241  
 0.4092117665112072 0.5615340855305452 0.0780015841895667  
 0.5774167695538261 0.5652826151319467 0.0692218595404768  
 0.7244664387685774 0.5870366935045439 0.0758306142292203  
 0.8567209787265780 0.5710556434678554 0.0835876906467544  
 0.0060011270914792 0.7023866364579244 0.0744751227479933  
 0.2952613076417254 0.7340274099573075 0.0780237407349570  
 0.4282423573473926 0.7144671855628194 0.0852150584935702  
 0.8356154179987221 0.4174605007328964 0.0796143780111142  
 0.7238431131978561 0.4188869521622529 0.0795726151940143  
 0.7140612087199631 0.7136142465137263 0.0843316229179461  
 0.8389585991041469 0.7017975959294734 0.0745018513804362  
 0.0068888758175296 0.8709569280458674 0.0707086391878303  
 0.1300635091157957 0.8503782689989742 0.0665698363976786  
 0.2964698612688355 0.8462590920110572 0.0775508338519131  
 0.4086460158517509 0.8474407365727574 0.0780044296946591  
 0.5808431582979823 0.8474976096874505 0.0777488661016343  
 0.6919215063032529 0.8456524505453270 0.0773876362455888  
 0.8629703001518982 0.8498271118113175 0.0664919054109838  
 0.5811747525615029 0.7334984560644384 0.0779366636362423

## Si

0.7169716798026389 0.2914397676121613 0.1317586431914711  
 0.5711893540619135 0.2855912344257209 0.1373785658334257

0.4319099835268572 0.2902316377890861 0.1270398462146215  
0.2869869417103754 0.2832095714852486 0.1196595112346619  
0.5671374724387167 0.1422101598127720 0.1276288303479726  
0.0002633705660218 0.2861241116176559 0.1304288581720143  
0.8567728363999038 0.1425624889953617 0.1303491109553520  
0.7156234850846437 0.1411252888134647 0.1255980892874588  
0.8568584703994926 0.2860339816320989 0.1343229269922139  
0.1392089675696497 0.2833657877742029 0.1192150640526509  
0.0016354507340381 0.4271491109389774 0.1257007318983789  
0.8093761316273582 0.6196494500956133 0.1641014868347140  
0.4282947004124313 0.4279270575555489 0.1382317043396566  
0.2623343075444451 0.2131158288879508 0.2373248355216450  
0.3769095895722935 0.0481093041494670 0.1581433285926414  
0.6638237105378542 0.0478931479087006 0.1584450629608168  
0.9531411328220505 0.6198490154256779 0.1639670374519652  
0.0946642385830171 0.7658793659809719 0.1581467305353583  
0.2377586190499484 0.7621182580958791 0.1646396417760552  
0.3803867164362474 0.7623645302917562 0.1656865514403661  
0.5243771333878317 0.7623023940985705 0.1654214171240543  
0.6667885470682947 0.7619923940750339 0.1647053112077854  
0.1424116153684758 0.4279747833563685 0.1380430645328704  
0.4316758551185071 0.1416818951116505 0.1269948262964119  
0.5739358831026502 0.7195483287727918 0.1304292241608759  
0.1379806643817938 0.1330220926801045 0.1402017997305197  
0.8135506648909644 0.7654673219880497 0.1580298617752301  
0.7148479175140110 0.7144548614736735 0.1381689595358508  
0.8525525352920026 0.7108541322209159 0.1269999738928367  
0.0019052345698123 0.8611400708445864 0.1238241739232154  
0.1389585899895345 0.8561509498930114 0.1197527148053977  
0.2882504697132412 0.8545115600308655 0.1295387852822560  
0.4229731611858696 0.8544887268526452 0.1304141449462715  
0.5738160116374028 0.8544921485585542 0.1302144945216572  
0.7085993914666270 0.8542461233127930 0.1293216284018485  
0.8595885965215361 0.8558044388672718 0.1196030359238675  
0.0950693538179796 0.0477357731922853 0.1878673902854512  
0.7170604275964605 0.4257207898326219 0.1321320327745479  
0.2376778514236750 0.0468616293998655 0.1554825284746799  
0.5674172211772719 0.4255044047179581 0.1287044610460147  
0.2885561626936435 0.4342217250112083 0.1294263840580725  
0.0097885635066187 0.0048508482040734 0.1401946120589502  
0.1378054939788167 0.0049908826812918 0.1405179281570456  
0.2866312918085850 0.0038255408019485 0.1197543748259603  
0.4279388228539833 0.0005211872664746 0.1378319833364204  
0.5725393046845324 0.0031198958181216 0.1215798098138546  
0.7148960133752496 0.0003901878664450 0.1379149770427756  
0.8595506824725792 0.0036246998253288 0.1191566546365116  
-0.000986906923490 0.1428932243080208 0.1293117840530612  
0.2816383223241357 0.1408805353976632 0.1238548197491648  
0.9521776613237432 0.7617189690037262 0.1383819727109347  
0.8084559287949662 0.1893077695487238 0.1589087408276428  
0.2379457965879893 0.9048305747471661 0.1361431574460659  
0.5231077869991810 0.3333973114019946 0.1641246422349548  
0.6660090365913296 0.3330458573976151 0.1663419712629908

0.8099171620926462 0.3329172856697827 0.1656695323068213  
0.9535101917946316 0.3343598868958214 0.1591371777611555  
0.0948632481975004 0.4789769739719084 0.1586031911556708  
0.2380539749988173 0.4761143041399598 0.1645291585538639  
0.3807945373046925 0.4759951805493106 0.1648084945967532  
0.5265405759679561 0.4786266427940649 0.1595831932186669  
0.6670650694707912 0.4756880055690072 0.1412210023974262  
0.8097334798285838 0.4767488875379722 0.1663438912066731  
0.9513378246074076 0.4761018188835152 0.1399507076557127  
0.2384135991270897 0.6194634530447198 0.1390907488406226  
0.8386570682889541 0.1424558952917159 0.4293158286789212  
0.8968453020023470 0.2445673849201861 0.4332920888126744  
-0.0010649431591729 0.3028658119611343 0.4299105475897539  
0.0412560597869013 0.2514575707251308 0.4607976745928755  
-0.0165360602301009 0.1574696242718719 0.4915977342740149  
0.9228701788831164 0.0656515306546130 0.3931572129960711  
0.8717855639578000 0.1687573779045067 0.3507657720106330  
0.8821128921697906 0.2602532615659067 0.3501394124298912  
-0.0264398235872400 0.2704648304183198 0.3510892061803462  
0.0763947718253941 0.2194595745873260 0.3939121351176505  
0.0164028894996876 0.1255217656042665 0.4259082626208748  
0.3773111253390687 0.3292319994166757 0.1581099886707115  
0.0959307655742595 0.9051151347657003 0.1554636103323872  
0.2382933755886106 0.3335755260197653 0.1357836431407545  
0.9522107958400035 0.1906696382268023 0.1569808846530228  
0.3806413106585926 0.9050080356401028 0.1646246223019174  
0.5232886067069710 0.9043345008066757 0.1390241052077561  
0.6666971283374932 0.9047428742159789 0.1644108535315723  
0.8092457632535390 0.9045215149847002 0.1357036724208651  
0.9516474387637288 0.9049399645350568 0.1552926567098038  
0.2614449686671342 0.0486664348672711 0.2374970584906759  
0.3516678245695574 0.0485586951886055 0.2397695592108438  
0.5503496190348998 0.0486667418488657 0.2406153901432718  
0.6397946420408663 0.0484245537809602 0.2403654632494479  
0.8379033009754742 0.0456945175863552 0.2398483512916500  
0.9293716235557714 0.0457483528935928 0.2371215581829804  
0.5235412044797250 0.6192189722638481 0.1392910655561937  
0.5263548434846425 0.0481639356652476 0.1586053191640844  
0.3804842411405597 0.6184104001892092 0.1654671451813335  
0.0945732253991249 0.6164059497870135 0.1587042482755390  
0.8135028525581849 0.0473784812588808 0.1582557001032622  
0.9514526571876398 0.0463135636171665 0.1550078261901470  
0.0965142551745184 0.1913906878901279 0.1549426555735476  
0.2378742524600792 0.1911532310772777 0.1553597341215352  
0.3810568570004939 0.1906066295794862 0.1384348589628317  
0.5229190358257122 0.1896376577586057 0.1639540089158614  
0.6666825386978369 0.1914342367187913 0.1399471754453863  
0.4283668402492069 0.7143989082289695 0.1390615922917455  
0.0954234301266160 0.3293564997288270 0.1583947259998065  
0.2882627327118429 0.7197722070483719 0.1304443616595498  
0.6129951231160783 0.6612256900847985 0.2662951182869207  
0.0010883910498999 0.7110876440888785 0.1269906924465677  
0.8057459059324139 0.1850252746977098 0.2438547922691321

0.9516436950438056 0.1912233346176036 0.2423248460057822  
0.0970285327114968 0.3048971180809736 0.2400103082146698  
0.2391752738107481 0.3334110776946182 0.2196905918882263  
0.3524861582683234 0.3035206929784598 0.2397604525258217  
0.5231782498252189 0.3317178764921900 0.2499465036667644  
0.6593622728961086 0.3297251400563362 0.2522594500986529  
0.8107277910670291 0.3322306928803635 0.2518539792785373  
0.9578116013653619 0.3371322848955393 0.2440987949786484  
0.0942453997796954 0.5029366753630434 0.2405128691875900  
0.2412136722632655 0.4770395706535069 0.2495579941810474  
0.3786398864364748 0.4765363485984987 0.2498329222003246  
0.5508117489627262 0.5023661437370784 0.2415605565933088  
0.6673452582446812 0.4754581809062732 0.2252162682709896  
0.8131241081895473 0.4833766259438059 0.2522705028664217  
0.9507825661715364 0.4768319859206395 0.2242923812431430  
0.0940110409115347 0.5924039788012628 0.2407191883075760  
0.2385068018144914 0.6193497325754371 0.2224003535665488  
0.3766052384977077 0.6105974179789389 0.2506084668371503  
0.5235699586718908 0.6191979251246065 0.2226448027420563  
0.6404266055597346 0.5919879364160356 0.2415369053907578  
0.8110802051646178 0.6195875058588536 0.2499168925500350  
0.0941961744203415 0.7910939693847656 0.2397746918789468  
0.0067080096804872 0.2876360314513406 0.2715531269846845  
0.1920652827812829 0.3743033140163685 0.2640608698394604  
0.9517480134472797 0.6198839773711822 0.2498012999167943  
0.2406281657326915 0.7644718678868451 0.2496326924407039  
0.5233984214651508 0.9042367279946036 0.2223277197933909  
0.3782719713085443 0.9021347191508152 0.2496090283212260  
0.2377437656655837 0.9050079285977265 0.2199051172100706  
0.0941076320261438 0.8813354702283310 0.2374772008213387  
0.3764858526575272 0.7663058419987827 0.2508038603585884  
0.8392679449048064 0.7902947070520063 0.2396749753820926  
0.6662540267664687 0.7641596153941502 0.2497322408409741  
0.5321912957530734 0.7661980993980733 0.2505582477276263  
0.8094222570846686 0.9036344904007149 0.2195842764277408  
0.9518538322352331 0.7608294935713095 0.2227775612457113  
0.9296786286684616 0.8804545242607992 0.2372559019509048  
0.8551175594522364 0.1360217802328837 0.2712654239868073  
0.2919372459212478 0.1459168081502905 0.2659642585768917  
0.4212015381039699 0.1425681715680902 0.2675358083757902  
0.5776545562609944 0.1440956617665374 0.2682066107548879  
0.7063761756594525 0.1438909311363012 0.2677626581714582  
0.0015356702479409 0.1413110097355002 0.2657397013596578  
0.1948262785555889 0.2438537297287355 0.2630919351699799  
0.4214979364721427 0.2786256027842708 0.2675872358704220  
0.5666276830166809 0.2831941410094498 0.2898515205046021  
0.7096743976616602 0.2789261034943449 0.2697038162871090  
0.8603432219164689 0.2824063510937921 0.2736655182333426  
0.6657690950967837 0.9015696759004491 0.2494354281726792  
0.6659545563159548 0.1920424934224235 0.2241984274413014  
0.1422287156905890 0.7148076691564458 0.1378721744624245  
0.3260620093862119 0.9529263005987252 0.2641190435250605  
0.3791430135049305 0.1895271399720893 0.3139191151719883

0.8898654784110532 0.0998391689648979 0.4600472105521488  
0.8641755040355061 0.7212878493285806 0.2675224372928000  
0.0001616455453203 0.7215344060234219 0.2674765216172726  
0.1898351306411035 0.8166928677087582 0.2641169430768543  
0.3311735899453174 0.8116116184392830 0.2920842909596498  
0.4786096687802687 0.8147234415212840 0.2654535720688297  
0.6225755133545634 0.8112489989391470 0.2919695908378295  
0.7692410740647949 0.8158205616421205 0.2641849409653631  
0.9968418096205981 0.8508103065218570 0.2659264836736098  
0.1927920868493269 0.9499851736520110 0.2631582577319328  
0.5228314526226173 0.1910792573419764 0.2497877431938683  
0.6130234658527560 0.9520790332302161 0.2657648710551949  
0.3819394559991450 0.1909305563737378 0.2228271107998004  
0.6641375883699687 0.6162127146189629 0.1595524584351586  
0.0970676884420104 0.2134667179721958 0.2370865602039746  
0.8513541523981104 0.4258311582270333 0.1317214205609889  
0.0005604786527890 0.5756306842455320 0.1276226086772408  
0.1396185892476804 0.5702196105150854 0.1216878971640411  
0.2882932479676730 0.5689643409185972 0.1303033230706000  
0.4232067518800073 0.5688182043786356 0.1304883382619594  
0.5730247475806957 0.5697203783728768 0.1224223375320763  
0.7172632507313608 0.5753368767075183 0.1286838668817566  
0.8571967943601912 0.5715746950085825 0.1373826323632956  
0.4786302936431394 0.6641776810906138 0.2653482410788260  
0.5776587854751508 0.4337814226819167 0.2687086202237488  
0.3280660670709518 0.6641787495461511 0.2655085567216176  
0.9985833195989036 0.5649556780067975 0.2683632361903638  
0.6653075317182722 0.1894869518876491 0.3172571345488202  
0.9897805762601882 0.1529823186723538 0.3467798909192368  
0.2374952741353198 0.3311036455952768 0.3097664543891940  
0.6666470576246060 0.4761922417856647 0.3143104478026190  
0.9533158355063407 0.4775480578012760 0.3178660010398769  
0.2376850969568551 0.6191053116974181 0.3108408194376496  
0.5236065949812091 0.6192277871937917 0.3112592812531650  
0.9532394572429275 0.7636199541256460 0.3139105631441734  
0.2367583484613844 0.9060136752427946 0.3094562877453970  
0.5236835877000851 0.9050687578679063 0.3108610639740663  
0.8116888785693827 0.9053036610405989 0.3097264245376731  
0.8989322795981388 0.9479562239809090 0.2630395551688554  
0.3269917120489308 0.3735564832674684 0.2643024626035643  
0.7684992469100383 0.9507072904650055 0.2639602798348470  
0.4814215380786515 0.9520547796775960 0.2657257139561402  
0.7118539563679701 0.4310282838907745 0.2690136881627914  
0.8640902915597979 0.4332761032604725 0.2698931980853156  
0.9987779287497518 0.4365306492412492 0.2679876832366773  
0.1906451195861876 0.5297347492644539 0.2658280404963720  
0.3315661690561060 0.5202338503703677 0.2920692495206438  
0.4815816503053940 0.5298072113174159 0.2663355605196882  
0.7090290637748905 0.5651623773342366 0.2686772194912908  
0.8596027727010538 0.5761406422095944 0.2898238176019473  
0.1906705929018719 0.6613363274901845 0.2657452599252901  
W  
0.9548176403549667 0.1869717761422534 0.4085980554169326

Site C WSi<sub>212</sub>H<sub>49</sub>

## Lattice vectors

26.880099999999998 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
 -13.439999999999999 23.2788000000000004 0.0000000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.000000000000000

## Fractional coordinates

## H

0.0137234568572193 0.0075285973732178 0.0928005849621698  
 0.2922699264291384 0.0138652597872965 0.0709625265864736  
 0.4276183603379256 0.0021212555140679 0.0869833953937979  
 0.5819610421237527 0.0206069966871009 0.0688831512621898  
 0.7148136763558997 0.9981019931609683 0.0895113597600904  
 0.8624756448511490 0.0136728622399035 0.0721948091696935  
 0.0058141059931871 0.1350141276431565 0.0764668599951731  
 0.1342632817303164 0.1277223075856858 0.0914590355776480  
 0.2704705142824838 0.1347239688645215 0.0750598699950417  
 0.4394145343872149 0.1361174707951413 0.0778423213160740  
 0.1345834882053504 0.0070153062875589 0.0924468025690937  
 0.1360336774334198 0.4269763748229956 0.0880010824089259  
 0.8391632943550584 0.1363918974625788 0.0798402191931161  
 0.0052000990675757 0.3038611089804826 0.0798104672219354  
 0.1269789919705061 0.2787131232600958 0.0705659856889198  
 0.2921716771026067 0.2782726994872879 0.0690532091096916  
 0.4397425051505711 0.3029065600014321 0.0766144175058052  
 0.5731626649549048 0.2866882537067408 0.0853921678379321  
 0.7266830075468586 0.3072859262098471 0.0830078756663559  
 0.8589495978856709 0.2877464172818668 0.0882234006202396  
 0.0082796835000979 0.4205109478360627 0.0827101186032966  
 0.7277243409771267 0.1410214994672918 0.0787982513574541  
 0.4292866951459162 0.4259352822223162 0.0841097652034326  
 0.2977638966311919 0.4508629572275716 0.0780134617478067  
 0.5577601662550412 0.1413417016327068 0.0773903822440352  
 0.5580967920157308 0.4178725781446551 0.0766879607996406  
 0.1419403565054728 0.7137470855017002 0.0917108543365448  
 0.0091410594684398 0.5898746695228090 0.0832537239541598  
 0.1196599420231680 0.5616115280274947 0.0746017950331084  
 0.2647561833440604 0.5462238064723483 0.0671115787889755  
 0.4201385031748510 0.5465231805026881 0.0670115667296486  
 0.5846443241741788 0.5620876584924389 0.0673245557575380  
 0.7275085939119362 0.5887569792535037 0.0788301673406363  
 0.8596540225446710 0.5728240736452129 0.0880914691949018  
 0.0073959003161427 0.7037900452267989 0.0809962850089874  
 0.2731276576943006 0.7284150601358282 0.0730243391524640  
 0.4283556024923627 0.7203669956129328 0.0610019794445234  
 0.8407968286217017 0.4208690333867777 0.0841494581471244  
 0.7267636325183886 0.4203332569199643 0.0828142058917277  
 0.7150887338690008 0.7179277501609013 0.0886955785631496  
 0.8404356045580527 0.7046410880932006 0.0795540030531416  
 0.0074490532659702 0.8726917725658507 0.0772933484122978  
 0.1274110911307302 0.8491824367470915 0.0725507585683589  
 0.2952604943190132 0.8441444288659435 0.0818678619021359

0.4164938474498159 0.8712156689031534 0.0701227481843963  
 0.5992234572655846 0.8750893297334228 0.0701510649533163  
 0.6897764720796702 0.8443043315720268 0.0831367732109836  
 0.8631843898595210 0.8507066601844078 0.0720172678918542  
 0.5974666483552743 0.7288689347312043 0.0723161773278285

Si

0.7186144041636587 0.2929728143264020 0.1354257297292696  
 0.5719866884936279 0.2865237696820673 0.1391555076587122  
 0.4316476630202068 0.2902777658603763 0.1293085628628667  
 0.2863841756610704 0.2829521569424223 0.1220558656390492  
 0.5684007475654528 0.1443296943671817 0.1303445508467560  
 0.0010575709941812 0.2904665491173928 0.1323341529412758  
 0.8524909140179383 0.1416213049487695 0.1324169379349663  
 0.7190580027038407 0.1440266204947668 0.1315781440071417  
 0.8584751440392050 0.2870114399232256 0.1419922807908074  
 0.1387016800132300 0.2832164721744992 0.1233475793578968  
 0.0024226565344379 0.4268561056356532 0.1355077622628030  
 0.8103482372198867 0.6205790451414827 0.1680507443355978  
 0.4293083295286456 0.4273455680267666 0.1379141559899893  
 0.2619938823635807 0.2146891092321631 0.2411034027157075  
 0.3768207018142734 0.0487716317388568 0.1622623592585629  
 0.6648131742894031 0.0496400578643967 0.1610583113261608  
 0.9537936164715487 0.6209045399294496 0.1701014891006991  
 0.0953274627388656 0.7670425828170530 0.1650371557041236  
 0.2391744376964884 0.7626510950963671 0.1694964678735715  
 0.3806015489457401 0.7652916455420143 0.1431007462341760  
 0.5257367621444653 0.7651921149237476 0.1403346338522920  
 0.6642137985042273 0.7607437570428511 0.1690118140791558  
 0.1407137627843628 0.4273998683477976 0.1416468576926908  
 0.4315054286013774 0.1418648705603778 0.1303560216576895  
 0.5776259792930897 0.7172060843865191 0.1234346719960067  
 0.1375842403556777 0.1333131171493679 0.1452721168626510  
 0.8133405655529518 0.7663950275125362 0.1634608684857766  
 0.7149591626281745 0.7154871580884675 0.1424696647324827  
 0.8530895494194086 0.7124092063765476 0.1322555252848083  
 0.0022356305693168 0.8624882469585050 0.1303727308164394  
 0.1389353299184989 0.8565843118274529 0.1253915923582199  
 0.2879339258537406 0.8548469996617464 0.1335206475597048  
 0.4261779036849389 0.8630639419672154 0.1217829899917455  
 0.5789097000494251 0.8633850569161715 0.1211258092390190  
 0.7077212701616157 0.8538682223101873 0.1348197113706871  
 0.8592545386275315 0.8567111022532441 0.1251011657097908  
 0.0952244752073867 0.0485410136898398 0.1934972616285923  
 0.7187024941692846 0.4269315395061378 0.1351780303736632  
 0.2377233839263958 0.0469317840534376 0.1605174832952558  
 0.5684699104913311 0.4255959008605554 0.1296823699689359  
 0.2890113650287682 0.4340045117668507 0.1299837435134844  
 0.0092244130869906 0.0052843839906132 0.1466882715301616  
 0.1376696378513255 0.0053133622106433 0.1462965294654048  
 0.2863075182629868 0.0038498104696502 0.1240248627343188  
 0.4283773428583644 0.0022675690765782 0.1408070440376565  
 0.5751521151571074 0.0078111522377387 0.1215120040253211  
 0.7149396622925540 0.0003493110438779 0.1432963831407401

0.8588461700215824 0.0035529919253797 0.1252119905028413  
0.0015767296689583 0.1406078737397312 0.1295833610503222  
0.2809011345876779 0.1405879197902030 0.1281116851987098  
0.9527165635667456 0.7628489855452385 0.1440084322018270  
0.8102371245438338 0.1910714500365578 0.1684169276986509  
0.2379008511519950 0.9051410418598298 0.1412590588924586  
0.5235132817286118 0.3338590621807302 0.1654425060747911  
0.6666248540616602 0.3340089187004348 0.1687767797897264  
0.8108662959141139 0.3343288213026789 0.1705685041457849  
0.9538230995948218 0.3342966904322415 0.1696949707105250  
0.0962980337205082 0.4801960125262156 0.1665756039886392  
0.2381801730467753 0.4769419464482342 0.1627168310658905  
0.3831098583852237 0.4774655243552358 0.1626580133141070  
0.5278071291128833 0.4792639337858465 0.1590959981215285  
0.6681973716836433 0.4766554823751103 0.1429739415661463  
0.8109179149984227 0.4779773236393473 0.1703433426373613  
0.9530644186543089 0.4773453726522017 0.1471537500924121  
0.2353605197145446 0.6189068644221464 0.139565858869541  
0.3181268134629209 0.6114189241701745 0.3900871450309794  
0.3550935862177736 0.7132574130297701 0.4195675401640684  
0.4559202184248628 0.7704695309565854 0.4291318029846328  
0.5282964490844554 0.7401905248260240 0.4258706765300385  
0.4947547515788018 0.6414193250113377 0.4057576729660655  
0.3751601272198533 0.5758277071556381 0.3406373295059243  
0.3596601023715157 0.6907432142122997 0.3232724209272489  
0.3741775299450828 0.7802108542637685 0.3488490712986313  
0.4772530225591641 0.8154981293825130 0.3453068115342864  
0.5313257500649139 0.7673906934387974 0.3444536707986192  
0.4707629354143943 0.6463313433334720 0.3154171816376274  
0.3770645932808914 0.3293472950195659 0.1601427674190247  
0.0962779861561457 0.9056048058421381 0.1619373189663308  
0.2380456074258236 0.3335801258653880 0.1384386907827308  
0.9521350015312439 0.1907354771696264 0.1436155749961222  
0.3816492036878305 0.9059838298356216 0.1659015069896144  
0.5255059118534802 0.9091857239338377 0.1373808537979936  
0.6642734647824858 0.9036343744320178 0.1683706339749493  
0.8082766462442101 0.9046120808643044 0.1417956111170503  
0.9508985001644044 0.9054006899762590 0.1616421672996122  
0.2617117126001507 0.0484454349281887 0.2425174984085899  
0.3521439667706474 0.0485039171733072 0.2440673418600472  
0.5519965036197474 0.0514919799125654 0.2421165319668013  
0.6411180315835172 0.0508147438933011 0.2428193379017047  
0.8369903760657560 0.0471046609525249 0.2457450686823388  
0.9278105799267330 0.0475407685077507 0.2435569089765550  
0.5264524840742199 0.6171737263772396 0.1373251891342723  
0.5274561845786908 0.0502079354594479 0.1601779137915529  
0.3782510435948146 0.6158568912628526 0.1344236077317952  
0.0961005517750252 0.6175257192296765 0.1678982013315396  
0.8132736749831345 0.0480970327542726 0.1639089395823087  
0.9506359202884540 0.0465949176056132 0.1615050552172996  
0.0960961364462119 0.1916675105334435 0.1602669186000539  
0.2377246118095439 0.1916502166999085 0.1592146925039243  
0.3807527976294282 0.1907631390375632 0.1413247897374613

0.5234549326116474 0.1909839729216795 0.1662320823109873  
0.6680507139316290 0.1928722950312821 0.1437981736129698  
0.4280184569641405 0.7159587025992267 0.1145974520408463  
0.0947895099490398 0.3291143318430215 0.1627215378263785  
0.2816991928955456 0.7184046418546305 0.1244967991406678  
0.6070188443042417 0.6567288525094799 0.2726736475623415  
0.0020667738102871 0.7122896773985746 0.1334701838189291  
0.8117497717280555 0.1925983789064258 0.2543062670953232  
0.9515582946138387 0.1910459689754804 0.2278586661293303  
0.0953709295542737 0.3044872760111118 0.2443795953133369  
0.2382228646185340 0.3336981241987516 0.2222399484799047  
0.3523211978944565 0.3052656261291439 0.2420716374607036  
0.5236973575006687 0.3323656395406338 0.2513498081961150  
0.6597961807524499 0.3305892069657489 0.2547417719238179  
0.8142758490660680 0.3309876833306097 0.2565864091100152  
0.9522330922060526 0.3326179545186037 0.2554943383974932  
0.0975033270461623 0.5042689426491841 0.2491674753507619  
0.2373846413416728 0.4757358404703467 0.2480192419332582  
0.3844562890617838 0.4763985876778394 0.2482593242578636  
0.5505077424076692 0.5023561052631562 0.2416274394614463  
0.6688681452030594 0.4761916756951756 0.2267601200755440  
0.8144100911607109 0.4846667798551043 0.2564054576059779  
0.9537982423999789 0.4774128926916462 0.2310151746566681  
0.0975849164852457 0.5938643437899421 0.2501074690979723  
0.2362353198488419 0.6193353417701358 0.2230190746931696  
0.3783055849793051 0.6148618375132057 0.2178528356622350  
0.5252283742279098 0.6174758386496803 0.2208616947499397  
0.6398945478215063 0.5924976124170670 0.2433010749704880  
0.8114175347054692 0.6202282425928166 0.2539512582140365  
0.0958821135855100 0.7922585975082141 0.2466955760680293  
0.0009105988712186 0.2793588841305412 0.2723361239802524  
0.1921405025506054 0.3738914289746496 0.2677630707205521  
0.9522431244273140 0.6206367747824012 0.2558975068978699  
0.2386380363651868 0.7621664714219452 0.2550592750971881  
0.5248805751885312 0.9088695184042734 0.2209188331508917  
0.3818819320205986 0.9076286475936109 0.2511311318682119  
0.2381502201143536 0.9051165723286497 0.2251142017190633  
0.0953795414839873 0.8824531920717024 0.2441265167888857  
0.3804942623558051 0.7679526211124293 0.2274623229431775  
0.8370770304790844 0.7910557859235541 0.2454045725243166  
0.6634107844934822 0.7586702936234530 0.2546841550463952  
0.5245587478509368 0.7663373545952820 0.2242976000029322  
0.8073356852509814 0.9041062792509246 0.2256163394679582  
0.9518665764413318 0.7617828606499254 0.2282337458428497  
0.9278550015117851 0.8814382302728395 0.2436254725050115  
0.8634413624507400 0.1424887175448059 0.2723800537486146  
0.2920695620365441 0.1469131867362328 0.2689345171785187  
0.4220044822549996 0.1434301269652566 0.2702495025037209  
0.5783862099561183 0.1459547294530608 0.2704926523535284  
0.7095111481822023 0.1453791490667793 0.2713972483220613  
0.9969490664716039 0.1458022475105939 0.2706279282997270  
0.1947949552439426 0.2462865389169409 0.2674222801206014  
0.4220211380037465 0.2805224941095447 0.2693301350876949

0.5671463108069684 0.2846521090641869 0.2925735213340294  
0.7126511803904029 0.2823445551832798 0.2720061391561005  
0.8597556223814463 0.2842672983004777 0.2951077923636516  
0.6627346362457965 0.9026466813443262 0.2540736149912595  
0.6687906512480744 0.1941501898380905 0.2277444546858149  
0.1424786583049572 0.7154585599050434 0.1455305665326820  
0.3249693327540543 0.9527310079809943 0.2698158152101677  
0.3802785768973546 0.1915096474605425 0.3150435178128195  
0.3948112192720799 0.5827259121122007 0.4231733202556075  
0.8631328023572157 0.7219535761345467 0.2721127686916214  
0.0007843045199392 0.7225893076264496 0.2731013193794334  
0.1924620198402370 0.8194478554476725 0.2715675941832422  
0.3383983251276920 0.8092514747884632 0.2783010336228042  
0.4770965650556058 0.8144558166424252 0.2546810592133605  
0.6042622758625238 0.8003655970918209 0.2768625933844757  
0.7670781539381964 0.8174225212934563 0.2708093631439652  
0.9967369773237013 0.8522524917148999 0.2712810502616833  
0.1946879515618493 0.9497122173946411 0.2695708418058697  
0.5237057846267138 0.1930422533515296 0.2521014532046306  
0.6109544126764748 0.9537654718866297 0.2680788362853989  
0.3823122802798675 0.1917622529309496 0.2255634605408943  
0.6643534307968728 0.6165001731015816 0.1611712594825086  
0.0952126580910996 0.2140186403865687 0.2424034462225799  
0.8532561934929607 0.4272928473517660 0.1368953841901775  
0.0026540915263792 0.5773022805302990 0.1360004691552740  
0.1362830994586938 0.5694714785427123 0.1265015584615631  
0.2789896801942065 0.5644371866939356 0.1184543441710125  
0.4275379800932634 0.5651506772010738 0.1184648548935547  
0.5760827054225668 0.5689194106468485 0.1194211631921677  
0.7189924811812962 0.5767528376948887 0.1315974323320181  
0.8586832045604964 0.5729441336127264 0.1418635302929846  
0.4755597953672624 0.6669672863844519 0.2364196147588361  
0.5777498697167164 0.4343018518240404 0.2689291384303750  
0.3352766463098780 0.6677585972647603 0.2434423188298037  
0.0007866748703671 0.5666317489469976 0.2750486741381672  
0.6665213867777160 0.1914355862673181 0.3166512896227708  
0.9533609052074223 0.1898511809370348 0.3176740208624992  
0.2391039207188664 0.3335060039501949 0.3172779054384205  
0.6658141593382800 0.4765586574613821 0.3146218547598494  
0.9528181735905669 0.4767614434153321 0.3196457476578226  
0.2521054663472872 0.6205696405590979 0.3227052178954636  
0.5308316892485418 0.6086011060456586 0.3337667246199353  
0.9524860535363585 0.7642283962794804 0.3177196349836293  
0.2384674820723290 0.9074374991388032 0.3209450090428984  
0.5253770562803250 0.9114177237202119 0.3156884791060477  
0.8095695400977638 0.9051653321511722 0.3198423849128865  
0.8960855413594355 0.9485994604820916 0.2695916390932344  
0.3254674541876725 0.3744128069612619 0.2666522810275420  
0.7668375479430509 0.9502864765851990 0.2707862529083601  
0.4839895147696455 0.9551190131690956 0.2669492608922372  
0.7126150758075834 0.4317767052817320 0.2713390249874882  
0.8634049466235025 0.4322613668915180 0.2736360561413316  
0.0007766336230252 0.4349122958683214 0.2746990254168067

0.1973853745805838 0.5351348131799185 0.2710522911545484  
 0.3374623862466297 0.5300840180380436 0.2668495574350394  
 0.4855605974198401 0.5337161174293645 0.2709366230561230  
 0.7088238869463113 0.5658614654447421 0.2703375904422662  
 0.8594372333174652 0.5766709577416183 0.2951148518538128  
 0.1966950087318527 0.6603875647756189 0.2754951858558578

W

0.4294523977774375 0.6822476683308718 0.3767875338007931

#### Site C' WSi<sub>212</sub>H<sub>49</sub>

Lattice vectors

26.880099999999998 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
 -13.439999999999995 23.2788000000000004 0.0000000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.000000000000000

Fractional coordinates

H

0.0145415720504936 0.0072296346079942 0.0926204943035092  
 0.2920453056743919 0.0130532047516938 0.0714436362978116  
 0.4263313867834143 0.0002418234492383 0.0871309572331393  
 0.5768396045516913 0.0108229450767194 0.0701263672365809  
 0.7167744945552760 0.0002538429477019 0.0871214112720770  
 0.8638624706896151 0.0130450960690931 0.0714239704842453  
 0.0084116000210905 0.1344682967324370 0.0754923441818549  
 0.1355562253277470 0.1283113336532029 0.0925468832319531  
 0.2692015063059019 0.1346182646583766 0.0755569294740336  
 0.4409151124098800 0.1351516151052353 0.0784253008978020  
 0.1355129908340334 0.0072057072615071 0.0926123681604537  
 0.1426712131113093 0.4261352832641478 0.0870396989454186  
 0.8367771234478157 0.1349933338141736 0.0783450493493070  
 0.0079285531847984 0.3060654001054017 0.0782715475487742  
 0.1298249635188564 0.2790425034090627 0.0713930452753905  
 0.2920537036188740 0.2790441432772952 0.0713869940364536  
 0.4408395950920138 0.3057470133860467 0.0783436379593465  
 0.5512992827340102 0.2756909178652663 0.0801467160231147  
 0.7163843720965445 0.2898674587152325 0.0644719614640268  
 0.8672285610482758 0.2757088807061078 0.0801279696153474  
 0.0070955584312884 0.4147591529520577 0.0770860189196720  
 0.7281597026765361 0.1358862492677454 0.0771843811038179  
 0.4263000296949143 0.4261466484396996 0.0870335014871869  
 0.2958764401575298 0.4489164862083828 0.0804022974860540  
 0.5505900094858477 0.1358868139549838 0.0771949334521807  
 0.5505054791910798 0.4147611744713608 0.0770853106543036  
 0.1426624383935260 0.7166037180128275 0.0871084493805578  
 0.0069362027542979 0.5924474466116777 0.0772746408674173  
 0.1320762917312790 0.5661128644336343 0.0700536730690893  
 0.2954650933505073 0.5613704204037555 0.0805126950003218  
 0.4087377176579874 0.5613769281857141 0.0805110058873466  
 0.5768730980557323 0.5661231852700829 0.0700338853871807  
 0.7283629141460393 0.5924613251805902 0.0772515818420831  
 0.8673692675085924 0.5918765512258674 0.0802424661775141  
 0.0077988363605222 0.7014873223609476 0.0784699107854217  
 0.2954674417506981 0.7342544902154258 0.0805654231417377

0.4286203336928837 0.7144125264136161 0.0878916210699383  
0.8532510016400076 0.4263357281305822 0.0643924325865380  
0.7159476590649738 0.4263789110620708 0.0643854020481983  
0.7167955061611264 0.7166257111448344 0.0870894782887829  
0.8365544067430877 0.7015010000082187 0.0784497917476122  
0.0084227433767101 0.8740003090848631 0.0754917470664198  
0.1298049467201366 0.8508056614630090 0.0714690957949514  
0.2958879563955439 0.8470719244289514 0.0804921470467610  
0.4087300307898270 0.8475065179337812 0.0805892303018573  
0.5816274133215774 0.8475167623726066 0.0805829908823324  
0.6940320864193500 0.8470792920508182 0.0804784146410773  
0.8638546143379910 0.8508355012864882 0.0714426600145363  
0.5816303309369313 0.7342629068420891 0.0805567748263549

Si

0.7145706323688314 0.2862615633420950 0.1181099836581618  
0.5657597217088267 0.2829162077458470 0.1325973769340505  
0.4312060046394136 0.2899398738955619 0.1304219252245052  
0.2865413806681387 0.2823251125663599 0.1245684641513654  
0.5660781587523790 0.1410248326105398 0.1292792182514932  
0.0015829621988051 0.2899643429216149 0.1303007224432983  
0.8529266050753290 0.1413401864716653 0.1303634113945495  
0.7178320804026841 0.1410329734108350 0.1292771141313226  
0.8600137671892938 0.2829058269050360 0.1325943692815902  
0.1385857327855827 0.2823133280105599 0.1245745416300070  
0.0019699032164226 0.4251107272156823 0.1291783990786634  
0.8094070178790196 0.6194415353325351 0.1664312708343772  
0.4271545809125795 0.4269515589678733 0.1408335142002368  
0.2627702627184047 0.2128379487203555 0.2430090693700706  
0.3769583380640668 0.0483063364281451 0.1627711261120365  
0.6642222827928256 0.0472829260665969 0.1603826426821983  
0.9528723240934576 0.6194281095762105 0.1664507384030003  
0.0944804074240203 0.7658486108625748 0.1628051209531032  
0.2380810672963000 0.7622967705676988 0.1674566031404862  
0.3805828786956683 0.7623570159007133 0.1681557930997749  
0.5246228098011757 0.7623640120897730 0.1681487716602311  
0.6670667999377550 0.7623134426191298 0.1674424322593380  
0.1426096616531689 0.4269195910985423 0.1408394602716956  
0.4312451497958065 0.1413478441552616 0.1304877766454863  
0.5743163271958198 0.7198913865976684 0.1329403389322325  
0.1379491834341139 0.1331148168549872 0.1464059798715502  
0.8142217085706690 0.7658694721738301 0.1627832452886853  
0.7160230831714472 0.7157727005426507 0.1408997922188012  
0.8528955189044460 0.7115430993628009 0.1304174282240423  
0.0020338131654524 0.8612377084726351 0.1281711938812379  
0.1385206038704382 0.8562661820718113 0.1246543955010864  
0.2881237079108480 0.8547921166696939 0.1327001891912467  
0.4230778123767216 0.8545359887188334 0.1329792916717449  
0.5743171043550118 0.8545450860680039 0.1329773279598639  
0.7095228612678883 0.8548070455058909 0.1326844990448101  
0.8605974546109216 0.8562865439897058 0.1246346776161862  
0.0952401843899221 0.0476435487025929 0.1938225364859164  
0.7144218396660391 0.4282701376040134 0.1180466557908957  
0.2380153744410497 0.0472813464107561 0.1610982581197825

0.5659979191635912 0.4251409735849647 0.1291742919226676  
0.2881264975033502 0.4334260528819333 0.1326078047293605  
0.0097229207390640 0.0048300988503874 0.1464383048581400  
0.1379112879311833 0.0048093259800615 0.1464207927827519  
0.2865330401306358 0.0042708210567667 0.1246237378365518  
0.4271937391450628 0.0003194960807442 0.1409359301236306  
0.5729263866794113 0.0029821534478752 0.1234167675470960  
0.7160107587719126 0.0003420265240310 0.1409283233055717  
0.8606008822460606 0.0043022717572708 0.1246112715240316  
0.0020872812652719 0.1407849314156805 0.1281966121319371  
0.2815408737926111 0.1407921110812236 0.1282998807727034  
0.9522920391286341 0.7617413333313440 0.1418249985209342  
0.8094570313791914 0.1899757119450663 0.1662898250551183  
0.2377565643192477 0.9050453906970826 0.1401495934765010  
0.5233867794304586 0.3335322987333002 0.1661964479309955  
0.6650772797105431 0.3325193909563393 0.1467458812106898  
0.8103087353785740 0.3325108332092642 0.1467716967364979  
0.9529995908233175 0.3334992640072417 0.1661967770622556  
0.0957046663088848 0.4787430697485876 0.1602791209456105  
0.2381064655039551 0.4758903420349417 0.1673815581716366  
0.3806126579523447 0.4759024024155467 0.1673824453815549  
0.5258842885739197 0.4787657339963909 0.1602705016446536  
0.6657728389672565 0.4771099547405224 0.1397518543137957  
0.8103037546303034 0.4777448647539408 0.1463629469126721  
0.9541731370390411 0.4770863714156325 0.1397598634342999  
0.2386855576734095 0.6194025989398150 0.1412104980545182  
0.6575534803015644 0.3300456343534528 0.4358206716009899  
0.7131071885046438 0.4326323308994524 0.4294115185790258  
0.8158654182356578 0.4889925826096879 0.4354074130155700  
0.8622297799747478 0.4326396517940081 0.4294091541845392  
0.8151751743668672 0.3300809815907156 0.4357824357852732  
0.7118934930681085 0.2806485075401541 0.3432531763312306  
0.6459308731019634 0.3231076589032921 0.3502553165448952  
0.7107620163267944 0.4308815378432533 0.3422361306870155  
0.8201556416757121 0.4972788862699976 0.3499532785080722  
0.8629557356762739 0.4310212026647318 0.3422901400264172  
0.8199734200547575 0.3230034131815478 0.3502174292739197  
0.3769626132824883 0.3287363927230944 0.1627001821521518  
0.0954537985391388 0.9047089959314264 0.1611483293111733  
0.2378054732787013 0.3328082915463461 0.1400963057018655  
0.9523439767469238 0.1905576856706464 0.1418178375161295  
0.3806153049768375 0.9048250473823087 0.1674802971579415  
0.5235604853329440 0.9042678997296176 0.1412852521873414  
0.6670731152695386 0.9048448982145925 0.1674666401329700  
0.8101454424424738 0.9050733520747305 0.1401175371678001  
0.9520952148417169 0.9047241572403512 0.1611412563310676  
0.2627372439325867 0.0499906817542151 0.2430494584692247  
0.3533233161715078 0.0500587040140793 0.2446516202560344  
0.5503306273605340 0.0473999117672428 0.2421574571050162  
0.6399577442547959 0.0474160298016067 0.2421552687524617  
0.8396348498802527 0.0501846730577908 0.2446560100702080  
0.9301437171163207 0.0501113849984499 0.2430644580392141  
0.5235573858456175 0.6194148002701233 0.1412132590069148

0.5259248554938460 0.0472750060290257 0.1603889267440417  
0.3805887104896198 0.6183428959065598 0.1681005698052521  
0.0956772444670963 0.6170199661125518 0.1603372887453996  
0.8142355416899305 0.0483560243002617 0.1627669843879849  
0.9521119139045752 0.0473266473661911 0.1611133059983731  
0.0955463768809476 0.1907975118798116 0.1610831785168525  
0.2380370012141428 0.1908041189374961 0.1610615148538196  
0.3810336891525045 0.1905465409904272 0.1420546883813498  
0.5234138884336630 0.1899858440699972 0.1662910293465652  
0.6658634934058882 0.1888477615287290 0.1398305538728698  
0.4286077833633560 0.7143728132192119 0.1417538876178186  
0.0945581943097011 0.3287020809834242 0.1627150630177809  
0.2884132191162656 0.7198816587555023 0.1329515553029151  
0.6130161194172523 0.6616941840629998 0.2681764830641330  
0.0014845637274632 0.7115297234792352 0.1304310657242849  
0.8098062642310825 0.1891974264793038 0.2525868034670515  
0.9514978137923529 0.1914027480350372 0.2263071899220072  
0.0927517098894088 0.3033101014877919 0.2445989286822805  
0.2377370017574083 0.3326556423109571 0.2237576761051899  
0.3533178481459838 0.3033663583989112 0.2445777001538655  
0.5222950684781480 0.3332123815904057 0.2524966816077747  
0.6638638169073978 0.3318334702371452 0.2313544192395261  
0.8108551611750632 0.3318118771306313 0.2313767098822532  
0.9538101617502833 0.3331146173411006 0.2524977658931405  
0.0956414521736680 0.5030385424997411 0.2420451459173288  
0.2409767104564059 0.4762913525952194 0.2524052058127961  
0.3781585342851455 0.4763207480948896 0.2524079661004198  
0.5502434578554826 0.5030786210293254 0.2420337679154512  
0.6663975474547029 0.4764472129282165 0.2239882651350018  
0.8107563142069018 0.4786246602423809 0.2308998412591110  
0.9528957177637949 0.4764085398179012 0.2239953895311076  
0.0956382758161019 0.5926461853215745 0.2420968633277125  
0.2388919911779314 0.6195075203464846 0.2246220665385651  
0.3765925883156849 0.6103441430002078 0.2532481397348127  
0.5234566433468438 0.6195203488630323 0.2246268392314226  
0.6398548907951166 0.5926817176655937 0.2420758417783719  
0.8097467870410313 0.6206330235927879 0.2527657628828740  
0.0926148024865692 0.7893573777930429 0.2447012377652556  
-0.0021419950813490 0.2759047132514331 0.2736748785152298  
0.1894021832235265 0.3734580130511498 0.2675495384345291  
0.9537103913728460 0.6205989442552146 0.2527878228875673  
0.2409604620934477 0.7647625523710960 0.2524801196765168  
0.5234632745679970 0.9040699951268831 0.2246850501636240  
0.3781789606870063 0.9019488039036484 0.2525058788116138  
0.2377034165611399 0.9051370218157192 0.2238099880620526  
0.0926130725438640 0.8799133754609246 0.2430993145103100  
0.3765858253184436 0.7663525355442175 0.2532993169715432  
0.8395863359876837 0.7893755298334908 0.2446812825624774  
0.6666448469169290 0.7647800794379140 0.2524674500512226  
0.5326168000071176 0.7663565870357494 0.2532941166869391  
0.8102830428933276 0.9051538918218840 0.2237674198082815  
0.9514347682683870 0.7600323345021099 0.2262662972374964  
0.9301344059869896 0.8799388387547007 0.2430935920244592

0.8670301263644645 0.1451092781260953 0.2737036837770865  
0.2955271690747361 0.1478086718062082 0.2719124641893776  
0.4210394443987803 0.1449677712924880 0.2736202599851140  
0.5783581443766664 0.1430212913162035 0.2690092699790524  
0.7076080681193025 0.1430361211179681 0.2689948175068878  
0.9949778483317071 0.1479337648068390 0.2719863771355225  
0.1927495504469245 0.2427733700520295 0.2673359215816000  
0.4209929873973206 0.2761650014598373 0.2735891744633481  
0.5787324489760943 0.2894934335009067 0.2778647218295071  
0.7138435726294665 0.2848127603311897 0.2567577421408296  
0.8536697990556181 0.2894544451909549 0.2778397849933121  
0.6666417616752045 0.9019623307698419 0.2524921631392557  
0.6664779545931142 0.1900447960636736 0.2240733440008104  
0.1425817235023085 0.7157514210642436 0.1409175204426681  
0.3268099395008706 0.9534182396002134 0.2676411275792858  
0.3797702752351473 0.1899470197138266 0.3262165937073014  
0.7131361629699992 0.2835627277082119 0.4292374370986151  
0.8671911261946713 0.7220090550624015 0.2738720265387594  
-0.0023622670423565 0.7219881340815920 0.2738767729551904  
0.1893342645102277 0.8159788681719080 0.2675974938339759  
0.3314303933103848 0.8114616705038279 0.2949790674400269  
0.4786780754806946 0.8145039949827441 0.2677156484575571  
0.6228868158951771 0.8114795023148519 0.2949712694846192  
0.7694858395352600 0.8159985406320293 0.2675680929776544  
0.9948083668016956 0.8467954521872183 0.2721231667373818  
0.1926618652455556 0.9500078914314144 0.2673685940595519  
0.5223948560005292 0.1892409574624424 0.2525800865983477  
0.6130750299825142 0.9515007230078889 0.2682017621723959  
0.3827349739914142 0.1913986961776329 0.2265304066654410  
0.6641907020094242 0.6170413167756010 0.1603151865480450  
0.0927566354250852 0.2127810722099705 0.2430292573556865  
0.8566908909775294 0.4282503469303129 0.1180559765969586  
0.0018898152363868 0.5768765264830676 0.1293389208809447  
0.1399756085132989 0.5700414047899631 0.1233351606638908  
0.2884128497594992 0.5686558728858853 0.1329069973348700  
0.4230830259284833 0.5686665581616102 0.1328987239250715  
0.5729089403139537 0.5700651230164310 0.1233286209134447  
0.7178382114064311 0.5768983662147291 0.1293223220817295  
0.8599966718638924 0.5771426898110525 0.1326437214975749  
0.4786722230262599 0.6642698846259093 0.2676688773621271  
0.5781423899668481 0.4353848515905933 0.2689321766756393  
0.3284357184022314 0.6642635014533488 0.2676613204925904  
-0.0000000987925459 0.5646557613905763 0.2689337987547712  
0.6627232559206121 0.1825003138756150 0.3188089567462115  
0.9530184642115215 0.1899382836056916 0.3267283893171559  
0.2372856951312912 0.3318210105093971 0.3119089686661211  
0.6624708304007588 0.4803817769641011 0.3185552578899086  
0.9607443282489766 0.4802990986391534 0.3185527912136984  
0.2380489077375275 0.6190430134154316 0.3131049243707682  
0.5238518733668884 0.6190661847179412 0.3131292334131867  
0.9529652204599670 0.7630991123364054 0.3273564362724503  
0.2372356886306667 0.9055286929183345 0.3119035634368781  
0.5238910664535760 0.9049026667206865 0.3131052098458161

0.8111528863761294 0.9055836710642272 0.3117998530833396  
 0.9002180941029712 0.9500816613245858 0.2673150676709243  
 0.3268371533401447 0.3735008074975273 0.2675855015120111  
 0.7694923810554355 0.9535030851272832 0.2675768718198135  
 0.4812887237644622 0.9514947491458972 0.2682163294751353  
 0.7138265633375896 0.4289814731613977 0.2561480873227116  
 0.8580117414387306 0.4289501110765185 0.2561825515704864  
 0.0000589907261746 0.4352949168214492 0.2689182694456635  
 0.1915086239472225 0.5299064815290880 0.2681249588686467  
 0.3314397264089201 0.5200583180052624 0.2949075315959160  
 0.4812441052366329 0.5299312981857224 0.2681370657237889  
 0.7075254254787415 0.5647137595555383 0.2689108361567067  
 0.8531779643643083 0.5635441433088333 0.2774340827187069  
 0.1915003257063544 0.6616731333679425 0.2681808704717460

W

0.7630439649720078 0.3834086623374685 0.3898729734220668

### Site D WSi<sub>212</sub>H<sub>49</sub>

Lattice vectors

26.880099999999998 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
 -13.439999999999995 23.2788000000000004 0.0000000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.000000000000000

Fractional coordinates

H

0.0133242636136452 0.0066993436909611 0.0877611803473658  
 0.8373605395010851 0.4173730351880479 0.0832693470109965  
 0.0062526403756091 0.5857158382527147 0.0794208292480277  
 0.1304423117593554 0.5634732556489096 0.0740147311073004  
 0.2945665250496974 0.5588975233536531 0.0833970071343956  
 0.4092105402427199 0.5741944709485656 0.0736447450740756  
 0.5826792805872009 0.5801536828930687 0.0575299173917678  
 0.7307845759718431 0.5888760740453131 0.0712375487902484  
 0.8579999083060559 0.5689267180230062 0.0851413633483675  
 0.0059396620087201 0.7007283947502029 0.0768149134945619  
 0.2953352089581642 0.7318700562045699 0.0828723864962244  
 0.4265121596753795 0.7122995465573223 0.0900720604683396  
 0.5814349314206440 0.7395937003180575 0.0786206016773422  
 0.7190465144544737 0.7224019943424616 0.0816272919415763  
 0.8402453084949186 0.7035673120560143 0.0746905535148225  
 0.0066357835820542 0.8704149606416546 0.0719932602204526  
 0.1297110402613414 0.8483367564266556 0.0685702499186459  
 0.2962689134647894 0.8437031525373329 0.0814800312024224  
 0.4080196571795158 0.8451716934222003 0.0827352914132643  
 0.5794436936849643 0.8469549767055156 0.0818406593957119  
 0.6915548072532181 0.8481588828733072 0.0793442119081809  
 0.8631059456994146 0.8511192728725556 0.0675155893562296  
 0.7272011196252309 0.4142148108975871 0.0811403490679781  
 0.5656431096427957 0.4197267526035407 0.0613704193234583  
 0.1421363736466200 0.7115279884675121 0.0882510768314150  
 0.2789967086103270 0.4446896110542506 0.0740881363762110  
 0.4253451241376460 0.4247376360943684 0.0692497141080689

0.2920626351813689 0.0093873156456853 0.0673744389968868  
0.4293665701328327 -0.0012601330157121 0.0879906714250289  
0.5758503010929951 0.0118552072588760 0.0740491711739239  
0.7118970320396211 0.0009101682058322 0.0880380167206609  
0.8617920813195098 0.0130285211950728 0.0684794794731193  
0.0037213099353065 0.1350168885638660 0.0721296648471003  
0.1283626300360224 0.1240273578793280 0.0852236638478577  
0.2753458471279831 0.1336947581471162 0.0693091179982683  
0.4428831340329178 0.1382745728840646 0.0784082240641041  
0.5524526124045370 0.1372411847006701 0.0817537329488685  
0.1334888192640589 0.0048503302015469 0.0870092321649831  
0.1448625979524192 0.4301673018272395 0.0899669778249276  
0.8372976246805904 0.1371353899791339 0.0778030084236325  
0.0041781103165997 0.3032748420633251 0.0778008257826558  
0.1298938480616973 0.2809726563460418 0.0687673633408004  
0.2782233313033527 0.2760126418843121 0.0589586648022003  
0.4322111005062044 0.2892872714508813 0.0627682441544663  
0.5785418584610151 0.2749213893537170 0.0815481912018074  
0.7232334612537930 0.3048632677379597 0.0838965084890564  
0.8552501888323898 0.2853554374714421 0.0876639195282317  
0.0057037156116597 0.4178152627837522 0.0802004817370916  
0.7223644061890634 0.1368031840554889 0.0799696613128816

Si

0.5227831099174001 0.9032871646337142 0.2270258101038948  
0.3774821306637029 0.9008111766198226 0.2536996844516307  
0.2369393559512255 0.9035377947013811 0.2219319905631454  
0.0933257536937289 0.8804342822084119 0.2390599626046207  
0.3763246161711308 0.7641070135498865 0.2558508676019676  
0.8387652585983453 0.7904030411962808 0.2403248665166544  
0.6656336210651508 0.7621921158830576 0.2496203982058177  
0.5325815284222110 0.7643008544537460 0.2543256112204779  
0.8090183968570229 0.9041400483425923 0.2213427332402754  
0.9509237235023875 0.7598585250679105 0.2239538979612081  
0.9291200935631961 0.8805116357304460 0.2384920590978399  
0.8623808940821840 0.1413236968559467 0.2699185697465040  
0.2891191254854633 0.1452175482963350 0.2664902314613418  
0.4165103455143578 0.1406521607852549 0.2727630416246586  
0.5768483249739749 0.1446528000578062 0.2745317525197346  
0.7070781066197463 0.1442311159630117 0.2734661965365153  
0.9967323108698092 0.1446043937518690 0.2667461579834067  
0.1923575725683180 0.2407807427694786 0.2644013917448923  
0.4192997921299528 0.2844314706553446 0.2608973295507170  
0.5617955973749296 0.2904169072159164 0.2791592272892236  
0.7092411681375423 0.2800374429434598 0.2745370548531758  
0.8576917971245351 0.2826630472671300 0.2939976876203765  
0.6656844192630086 0.9011175102424333 0.2528336075278027  
0.2400358624024025 0.7626600259487815 0.2539076059708733  
0.6652995380065069 0.1921197630693844 0.2302985858810439  
0.9502711793019178 0.6188138291219222 0.2524349953033161  
-0.0004197373498264 0.2778200313286671 0.2697733249098713  
0.8090690877897088 0.1906938619365314 0.2538022040088813  
0.9502557902460534 0.1899000901421366 0.2249504860834723  
0.0936849869418666 0.3014409253516710 0.2422194715693712

0.2328854307169516 0.3291160247910095 0.2224259695556207  
0.3489630759873906 0.3010475104605665 0.2257016252909315  
0.5175182051027272 0.3336480906119759 0.2322935440932495  
0.6607109399849804 0.3330277042297110 0.2546965042948804  
0.8107979995512022 0.3292467556600654 0.2565610969215630  
0.9498810898757709 0.3306381145992904 0.2537119584244277  
0.0942938817475048 0.5008727537997327 0.2466116111404888  
0.2378728878170294 0.4705384237662310 0.2552519588399180  
0.3805545245218916 0.4700063881468685 0.2332319020287723  
0.5509519007815762 0.5028696349459910 0.2222135120153644  
0.6683953727478590 0.4759891813749084 0.2209149930917533  
0.8112550037719870 0.4834048718134292 0.2548278214810749  
0.9497290642212805 0.4745405759902512 0.2289259493206639  
0.0943312018667255 0.5906962587165568 0.2461172422718923  
0.2386713929058539 0.6168772708680733 0.2281291873972594  
0.3807600854081728 0.6120992926167216 0.2545657741156736  
0.5242704753694745 0.6202753646034601 0.2199634929912717  
0.6399834306454000 0.5919305117440734 0.2327050902832689  
0.8089426171977933 0.6187117389041763 0.2491301207895964  
0.0934633519724927 0.7901819029673969 0.2420030462991330  
0.1881712153258770 0.3680055497217638 0.2702417043157003  
0.3253080226482508 0.9522709711372144 0.2664382257481888  
0.5719550651570146 0.4338078146383292 0.2527229598649573  
0.3760360262381431 0.1921633749017691 0.3175852932872804  
0.6654529785781338 0.1904191978027591 0.3222176017924318  
0.9527004135596754 0.1877808646809515 0.3137670428172807  
0.2399455716829479 0.3279991648945249 0.3147219653735544  
0.6625920798794405 0.4798026863438076 0.3165329263105879  
0.9507821326076000 0.4755275583057897 0.3177903947994265  
0.2379082207102658 0.6177694549014975 0.3189316980844082  
0.5277678668432795 0.6149007739117944 0.3157845422119802  
0.9512966295998841 0.7625527899022555 0.3145203942238968  
0.2355447062637091 0.9059564874361308 0.3105300362696875  
0.5230910534825994 0.9034637792073438 0.3154166262598117  
0.8108691375709638 0.9040157967567898 0.3109904009347960  
0.3661979484442238 0.3684014707533910 0.4147217180492034  
0.4166918156417458 0.4683936400791598 0.4265444661546896  
0.5200629837588130 0.5236594334140385 0.4250341719299820  
0.5722248598503902 0.4730974291510988 0.4246025304261287  
0.5174816597118950 0.3694928831616459 0.4264117831715173  
0.4514932646401962 0.3275968987570802 0.3376001935276221  
0.3765294948419025 0.4036394781613780 0.3369578300443273  
0.3802545179959468 0.4914335199864224 0.3513910369564047  
0.4762839674362961 0.5148142796312734 0.3381082699329039  
0.5622823410559720 0.4279672088074514 0.3379061281954296  
0.5397600608732374 0.3320179750364571 0.3506656971791615  
0.8988336998304852 0.9486584228891380 0.2646630400991268  
0.3313066550845860 0.3710502697340756 0.2604962841220043  
0.7686460500408694 0.9515442668174832 0.2664106183735592  
0.4806251104240266 0.9508296303787703 0.2706536286219703  
0.7089749881887498 0.4343317649852425 0.2710882187777112  
0.8603271201445980 0.4308534198799517 0.2725249050209385  
-0.0022359987443087 0.4328478009648038 0.2726751437408924

0.1915635745291124 0.5285269410854142 0.2723199512438279  
0.338266555958269 0.5140454946212692 0.2809087820474679  
0.4816175722675484 0.5240935231722668 0.2523440482894613  
0.7057192943007942 0.5638774644897833 0.2644650415550602  
0.8573532496479508 0.5763955723018414 0.2915554377422752  
-0.0017658352211303 0.5645075560336363 0.2722022670789977  
0.1912812551150730 0.6594270968850301 0.2710043632300955  
0.3275833880451212 0.6615835742549351 0.2714366056765435  
0.4825331094971594 0.6613521011162400 0.2695465571943376  
0.6118874536533453 0.6580902024693789 0.2636403734935663  
0.8624949846648227 0.7203586443412878 0.2677404455023450  
-0.0009050077200046 0.7206800968524212 0.2692591888442137  
0.1890897697785912 0.8155550619162951 0.2668807554203453  
0.3306300657276541 0.8100975377287718 0.2962380241433950  
0.4787309048995235 0.8130482532438933 0.2699430888986605  
0.6238093864546514 0.8096716132994086 0.2941295529472032  
0.7684400388243204 0.8152464911949835 0.2647668983914429  
-0.0042214889679253 0.8500975567534363 0.2670444003909556  
0.1920550312846078 0.9498420802828034 0.2639428227066604  
0.5182779674036447 0.1891150258301716 0.2550267429871957  
0.6124836290406772 0.9513142791632627 0.2703703320910955  
0.3785216701171022 0.1865876402465862 0.2252070791348117  
0.6651457681884007 0.6174365627936758 0.1511467352261944  
0.0944805976209212 0.2117487954517601 0.2383435737854136  
0.8508781138549465 0.4249479554895366 0.1358222931269021  
0.0008885560712907 0.5743333714510587 0.1323412256394023  
0.1393166306817523 0.5683600326693884 0.1272235101896386  
0.2879309853145489 0.5672778071360405 0.1356935611360316  
0.4243721639762543 0.5726670993726389 0.1251581219122970  
0.5753216595302924 0.5749084429032508 0.1108717146274937  
0.7192110843948869 0.5757513974911176 0.1236339433918069  
0.8571588702313752 0.5707295081732305 0.1388724050040405  
0.0009342004990848 0.7099458869235024 0.1292068764669869  
0.1418754520144534 0.7129620148602052 0.1420637742860140  
0.2879276307602447 0.7179202357819643 0.1353409174042364  
0.4278696430790266 0.7132565704340427 0.1439090128944263  
0.5739356219757694 0.7209271144143705 0.1300664901783267  
0.7163208952517818 0.7169399128272872 0.1352733883629814  
0.8528809966504605 0.7111485532831647 0.1273644011307958  
0.0015968436215473 0.8604916126266765 0.1251024257103480  
0.1385659148046937 0.8546034398155932 0.1217345469839930  
0.2877873982717517 0.8526862237314582 0.1332387128766161  
0.4223203903722858 0.8530283631776484 0.1351388350503010  
0.5727773655839254 0.8538687514017507 0.1343918757088165  
0.7081529548708839 0.8548904002318689 0.1312830588930835  
0.8596771999064525 0.8563324884216451 0.1206990368986522  
0.0950222200979380 0.0473130292258834 0.1881224251903445  
0.7176792530366410 0.4250266678952587 0.1321636737873388  
0.2369174724526479 0.0454396435706976 0.1552817669135896  
0.5710811187000655 0.4264804922704077 0.1147549083564877  
0.2832483135965270 0.4317033670836961 0.1257262262254140  
0.0090136537214518 0.0043425051966935 0.1416441121598905  
0.1369448954274843 0.0035221593222107 0.1408631652816639

0.2863070209753821 0.0021752997888141 0.1207170801603045  
0.4274559867824248 -0.0008049129729374 0.1417883547105353  
0.5718220011691106 0.0030629003895070 0.1272697156059591  
0.7134068805067504 0.0002681550874870 0.1418509074650025  
0.8585992377520753 0.0034025804079123 0.1215446128822929  
0.0003426980786865 0.1400041193011081 0.1254222368527040  
0.1351888083548891 0.1309636072850310 0.1387959474261603  
0.2814150471572458 0.1391172051002522 0.1228044806939084  
0.4311328107082665 0.1411401380317368 0.1306056042988052  
0.5657825349572257 0.1416118151329230 0.1343029281671046  
0.7153966984935349 0.1415734300722331 0.1328158538446779  
0.8508972158486107 0.1411779983350288 0.1302846817824547  
0.0002277392376329 0.2897921605071862 0.1303051997241148  
0.1387585158952695 0.2828056145370293 0.1219525213273754  
0.2816872306799956 0.2800551990847964 0.1125705669836762  
0.4289698779756683 0.2859820075351611 0.1163587201349439  
0.5723071529632379 0.2826656556294068 0.1340793410487594  
0.7160360365120847 0.2908853264706346 0.1363720518396923  
0.8557914753721803 0.2849690622634469 0.1414482636088893  
0.0005654296195407 0.4246621766203220 0.1330206979992058  
0.1424780993064956 0.4272144401967343 0.1437516740917755  
0.4272457892911582 0.4266576799834794 0.1230614683593598  
0.2590594746415651 0.2108109691064186 0.2326042583855805  
0.3760709069093852 0.0468442977978807 0.1600663972872728  
0.6629573174652670 0.0478389300115176 0.1642663096209599  
0.4171496442532441 0.3185407959895126 0.4154577489535864  
0.8090323269720087 0.6194073346262690 0.1632637847959801  
0.9526855389375343 0.6188782987059906 0.1665731439246830  
0.0943427963473727 0.7645581438831172 0.1605834815199542  
0.2373351309296630 0.7605396833159286 0.1688754267116499  
0.3799898503621278 0.7610246881763142 0.1707587237879079  
0.5242637598663210 0.7613770226780486 0.1691573874357912  
0.6666143182313808 0.7618195996386029 0.1645762018845723  
0.8138812451769909 0.7658229410509582 0.1584783057179162  
0.9522271128067791 0.7610923100825221 0.1396179708151775  
0.0954206181411735 0.9039042333556134 0.1568361106601126  
0.2376286279587740 0.9033609351905367 0.1381718627560685  
0.3799092819088348 0.9036845881993567 0.1686753456748995  
0.5226322142962061 0.9039166034288544 0.1437275965488695  
0.6660246572779218 0.9044897010323075 0.1678765222718527  
0.8087438794117064 0.9044656439640095 0.1375417713251018  
0.9514443045380386 0.9045966561932163 0.1565923706884517  
0.2607259894170914 0.0487922331738339 0.2374418816943677  
0.3503313144626526 0.0477843888946301 0.2412708079685724  
0.5492056175764846 0.0484022961675772 0.2466702335405859  
0.6390868594236463 0.0484698158887618 0.2462683849193011  
0.8384034797255472 0.0473014765524561 0.2420626927550732  
0.9287814948579544 0.0474361129361258 0.2392095362709330  
0.5242828350699825 0.6205235782604068 0.1365499261921312  
0.5252021165803571 0.0474044906756603 0.1646169796296819  
0.3810037484352852 0.6165847052880546 0.1690855498865055  
0.0945440353881494 0.6148710793477311 0.1640519632631468  
0.8124603298193260 0.0472980549897434 0.1605825670118418

0.9506938460990442 0.0459857095447295 0.1570328270192169  
 0.0946886185995017 0.1899119268281269 0.1560667050884778  
 0.2354230881642903 0.1888659376512274 0.1506301002529115  
 0.3802641684871746 0.1900867208423885 0.1410553371688257  
 0.5217872738776163 0.1904497110673388 0.1687858703505920  
 0.6654885521157706 0.1910989337132274 0.1461345304131218  
 0.8077580556867154 0.1889884479170419 0.1678984929064768  
 0.9507999795109244 0.1898452163387825 0.1407869766199967  
 0.0939614421670960 0.3278797478465192 0.1611181760764950  
 0.2379486371368970 0.3324185601339685 0.1388419853275993  
 0.3753207532681190 0.3274147162038064 0.1445477505279731  
 0.5229479313398473 0.3326668192170332 0.1477471639706699  
 0.6645647912540543 0.3332878621910575 0.1683978758246886  
 0.8086795432407725 0.3325780580344071 0.1706486050563312  
 0.9518370295388593 0.3323199600338881 0.1678158064803294  
 0.0943514440106345 0.4773698103598905 0.1645966173590760  
 0.2387208148021233 0.4743447782862893 0.1698621132300051  
 0.3799756134180772 0.4756918773494613 0.1492451258561778  
 0.5276008974815848 0.4797250267674322 0.1404694697809348  
 0.6685006219803857 0.4761063566666447 0.1368531542917036  
 0.8090717947580387 0.4763043581647737 0.1689111331368972  
 0.9508699804712424 0.4747313377184056 0.1449611711357082  
 0.2380991691102377 0.6176902396666002 0.1445983886256217

W

0.4754447413407074 0.4273250481685099 0.3778984589474119

#### Site Dr WSi<sub>212</sub>H<sub>49</sub>

Lattice vectors

26.880099999999998 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
 -13.439999999999995 23.2788000000000004 0.0000000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.000000000000000

Fractional coordinates

H

0.0160853900234967 0.0085652395679214 0.0877971558613529  
 0.0052949153087507 0.5869394757677994 0.0747088727411696  
 0.1314534943032337 0.5648121166594587 0.0689075910330625  
 0.2948086334316037 0.5610345599634800 0.0791803319904381  
 0.4068279036889252 0.5602889560425626 0.0792398790331610  
 0.5800596047249543 0.5672130579222056 0.0670328489342690  
 0.7240824867409773 0.5884790752726335 0.0744197519449988  
 0.8593467672124754 0.5730447613074803 0.0809318061327104  
 0.0046871463828635 0.7040683863502464 0.0746597677194547  
 0.2950550448474812 0.7328432909033648 0.0786336468957872  
 0.8383206500451450 0.4166926190409154 0.0776549627729348  
 0.7230250310553847 0.4152249357466621 0.0775591313414756  
 0.7147675331080905 0.7140341406884000 0.0824965892227863  
 0.8420758553316232 0.7035585038101505 0.0727109205249962  
 0.0050241224617817 0.8678984066190799 0.0717759493257169  
 0.1316093486675128 0.8513223424956172 0.0663443261933647  
 0.2968832480696705 0.8461013456631752 0.0781916336190142  
 0.4084392989187249 0.8469775888765335 0.0787507120784217  
 0.5819977422847982 0.8491137770984305 0.0772782023107577

0.6942209185041526 0.8477286703160494 0.0772427871703542  
 0.8651218122251630 0.8552516182281495 0.0651710225002605  
 0.5818968764646562 0.7349052049033774 0.0767052680861701  
 0.1433237569331942 0.7142838525056200 0.0840704552016295  
 0.5525768757503822 0.4149173139336746 0.0741869106719684  
 0.4264096129330459 0.7122958788217931 0.0858460535826485  
 0.2963629525203283 0.4498369193717545 0.0789807955082423  
 0.5553872394106668 0.1378994848498980 0.0767942183446905  
 0.4283339031056507 -0.0001728441147912 0.0850177288990563  
 0.5766171297745950 0.0119131689790498 0.0690607946739336  
 0.7151532026251616 0.0002487965250189 0.0845326373896433  
 0.8619773236159189 0.0101436976335143 0.0682313938544791  
 0.0062302577834464 0.1354739219742309 0.0712225449684067  
 0.1351075278280219 0.1272055936846243 0.0874210464735916  
 0.2723048426216464 0.1359873964637746 0.0716964358523259  
 0.4406484821406134 0.1374602960199108 0.0758647555867558  
 0.1351433651322539 0.0077901427578583 0.0873199389844368  
 0.1429608573815737 0.4281152204658174 0.0850237384843332  
 0.2928478482607048 0.0124744575476980 0.0670167223398530  
 0.4266621682563429 0.4268386361564837 0.0854430232398071  
 0.0060984128596285 0.3030403211419632 0.0748993707504128  
 0.1306237952756089 0.2798017003848059 0.0671633644649128  
 0.2932371591103247 0.2802490991864739 0.0680062249194896  
 0.4392013553342985 0.3027269653878710 0.0760068544863227  
 0.5710661716514812 0.2854934673944043 0.0852268473461384  
 0.7226661571785779 0.3035801535501124 0.0795061573142278  
 0.8571603030780635 0.2851609040963219 0.0830678743956651  
 0.0055845732103752 0.4173949012284218 0.0754137404094042  
 0.7242672102742027 0.1376126488455465 0.0757758928911011  
 0.8398482016928053 0.1366010191437900 0.0746843726008009

Si

0.8122415900882610 0.9079531373061063 0.2226416906484572  
 0.5328753401530258 0.7655418260104471 0.2491734135596328  
 0.6682954920886804 0.7646038957950955 0.2481297352147119  
 0.8400376802953742 0.7917612262214937 0.2368328317620734  
 0.5233508125810362 0.9037025212992555 0.2223777053197303  
 0.0931956396903048 0.8804791537284424 0.2375788006536135  
 0.2382717074433164 0.9048157440421247 0.2201744744886806  
 0.3783869295622445 0.9014315180003868 0.2504055964344238  
 0.9563176870360939 0.7635821361132373 0.2260279986358576  
 0.3761828528597508 0.7655624686683369 0.2513960675876814  
 0.9305913093742294 0.8816025225052500 0.2379482983056529  
 0.9965589471632527 0.1451258057177498 0.2659959661444961  
 0.2903723829054019 0.1443546870601407 0.2663502131891024  
 0.4210759702374309 0.1418841226533508 0.2684339937027618  
 0.5774916294644701 0.1431558455308774 0.2691391776393506  
 0.7090035510740982 0.1422756534369878 0.2684143826247993  
 0.1917652934344798 0.2418682423692251 0.2638908790713843  
 0.4204636073818327 0.2779877255067427 0.2690437158380674  
 0.5668684034013242 0.2838035259698551 0.2913538123065884  
 0.7117039892585789 0.2795691256784147 0.2693274029829861  
 0.8591761597355002 0.2833821651530591 0.2900689551123145  
 0.6672518432192011 0.9014719423232732 0.2497081498930009

0.8635980687124496 0.1421268264340742 0.2674486387243304  
0.2405129019540563 0.7640863316916399 0.2501154480527693  
0.9518408586952376 0.1911937273219083 0.2231353776382432  
0.1894352250880669 0.3728079888678475 0.2650665311334152  
0.6671880623171396 0.1907601105420699 0.2254255157461613  
0.0941257888218809 0.3029266116542305 0.2401631555252887  
0.2373210036858927 0.3320368524181360 0.2210402752886250  
0.3507495482197590 0.3022935427844949 0.2413594398395871  
0.5224712483880546 0.3320048570953699 0.2513833058644252  
0.6594957020326472 0.3286851272987577 0.2533409978008150  
0.8128452202414713 0.3291382973588643 0.2514307733707522  
0.9509267142868185 0.3315000024020029 0.2496463763846073  
0.0937566142386904 0.5022013887360564 0.2412132092467565  
0.2405838967995568 0.4759669501667725 0.2509271490794347  
0.3783472977448175 0.4755154173472080 0.2514879124838028  
0.5525999665959965 0.5043630578130912 0.2387998751545329  
0.6535872574160398 0.4501763456784157 0.2192370257074900  
0.8127985662866506 0.4840827107164595 0.2483201773141268  
0.9504171727196936 0.4750521519466624 0.2234929302600480  
0.0933965104399142 0.5917285296319948 0.2407009515944926  
0.2372825013779921 0.6187211048579533 0.2232035643061749  
0.3753822761917596 0.6098363107778365 0.2525328767412225  
0.5080678464305473 0.6108216831710643 0.2198009224431726  
0.6425848718285931 0.5949390449899338 0.2410576538339011  
0.8121759142002504 0.6218567194883889 0.2467045224256932  
0.0937886848788140 0.7905991278831517 0.2394324161360336  
0.0003396943146638 0.2792463593038482 0.2677668173800787  
0.9512718362880116 0.6209186703175192 0.2490392205611253  
0.1423875918741085 0.7145474640243819 0.1378931216729267  
0.8577135181376463 0.5721626899028189 0.1346827778287837  
0.3775364861222849 0.1880095990945859 0.3133361291480246  
0.6671904717074825 0.1890198437804126 0.3134591593726361  
0.9531781354852886 0.1895980589660901 0.3124219062294096  
0.2356186493156589 0.3296421983590992 0.3099856805075098  
0.6702647416107047 0.4813230605228169 0.3034438993130429  
0.9508310568520530 0.4763695409756873 0.3115050976034539  
0.2364725673857681 0.6187051825961680 0.3110134005968467  
0.5277658536874972 0.6217149212344795 0.3057022105798726  
0.9552409461174685 0.7642905089464364 0.3183660329280550  
0.2365636142520319 0.9053810527841805 0.3085412125826164  
0.5240692290692844 0.9035242041543864 0.3101968869871987  
0.8127013433855408 0.9071336292959505 0.3133180602326562  
0.9008568243554002 0.9504394688574217 0.2651928156578934  
0.3253314363560763 0.3724655881259968 0.2657156228575995  
0.7699556569645456 0.9534024653954950 0.2658389816794519  
0.4815349960377641 0.9510421137693603 0.2665434626217285  
0.7120770170473656 0.4294999256253555 0.2672198911724835  
0.8606674874477148 0.4308739142246438 0.2663834418228503  
0.9981135951895793 0.4336155819498389 0.2678278408325748  
0.1900604644878761 0.5290134330180853 0.2668066563657991  
0.3309158271026626 0.5191172991197694 0.2936725249272871  
0.4812620570170301 0.5286586132312971 0.2653595873962397  
0.7154575056700961 0.5796694301680254 0.2794643754926298

0.8582202714221633 0.5762357853320590 0.2877486729733047  
0.9978860665528769 0.5653960639618684 0.2669743536823276  
0.3265052826774826 0.9525396634535161 0.2648030521990914  
0.3269343647392692 0.6633950726130373 0.2664526529757038  
0.4771264115770149 0.6635638818045771 0.2644057231596502  
0.8588555614061685 0.7601352165196593 0.4228426708239886  
0.8616291291588801 0.7213646261073298 0.2710250946693828  
0.0018373413386228 0.7221004535162242 0.2698427648010754  
0.1894257047960282 0.8159186170783215 0.2640339795647638  
0.3310249561150302 0.8109022606227199 0.2927656389477912  
0.4786852400462179 0.8133386393291436 0.2647988844161028  
0.6235086069752155 0.8101755298400163 0.2909862210232049  
0.7692487544573958 0.8136530339691865 0.2698129043006155  
0.9981393568419616 0.8520932869089554 0.2684113651168383  
0.1920866542888104 0.9490900798236372 0.2631821359199001  
0.5232589369427794 0.1916176970338679 0.2513008932731946  
0.6133920538957975 0.9507184144148557 0.2658592026374185  
0.3813170151766410 0.1903848433441230 0.2241132294726459  
0.6648872097218356 0.6172555899425249 0.1585726359991743  
0.0935266488910476 0.2122999440727648 0.2378574694064509  
0.8512735055860116 0.4249463095898566 0.1302967314617244  
0.0007735954926128 0.5753974356440223 0.1275820318096709  
0.1395436108432950 0.5693470402652436 0.1221518902693084  
0.2887557733254415 0.5685846650982320 0.1317119256879211  
0.4244912040361660 0.5690817044506539 0.1310944314061894  
0.5745021350969404 0.5705661578299170 0.1201876854865990  
0.7171388663761556 0.5759407309539997 0.1271547454778830  
0.8111337340023319 0.1913019968288224 0.2497725594868026  
0.5760722291596557 0.4336886239760947 0.2677980695668708  
0.0007599747188950 0.7115270503974545 0.1275410842369238  
0.5235506727482557 0.9041570128403709 0.1390273609894718  
0.2882345299857791 0.7190918131903252 0.1311443354671490  
0.7157594928418154 0.7151245382775792 0.1363111776337653  
0.8528577265636064 0.7110455255672669 0.1256049276973320  
0.0011847553226353 0.8600021533696190 0.1251458262947446  
0.1391147260878519 0.8560525955023057 0.1196747769636156  
0.2883636278901048 0.8540538094511928 0.1301724612794151  
0.4229887485767055 0.8539078576924181 0.1311168772935594  
0.5744242610239040 0.8547292539525184 0.1298789791897826  
0.7090724103778692 0.8541604574048327 0.1295187996263107  
0.8610352097175870 0.8573805710574218 0.1186209106114187  
0.0956542243245516 0.0475933034187783 0.1892006521774587  
0.7163070667414571 0.4252595450408441 0.1295023698117806  
0.2375299534081344 0.0462022929740607 0.1558570896699105  
0.5676983991380529 0.4251565326874965 0.1264183584779991  
0.2890643293022657 0.4339585258037583 0.1310819615908441  
0.0103627410043090 0.0050968837109998 0.1415753638222924  
0.1376338150719113 0.0045762555648175 0.1411101665673165  
0.2868748976679970 0.0035446856876481 0.1201533162592020  
0.4280190744664724 0.0000154411988858 0.1388530651438261  
0.5727463760521304 0.0031729123237994 0.1222395942662097  
0.7152833340041751 0.0000482839669344 0.1383688403587371  
0.8590927882628524 0.0018485298269578 0.1215115216115804

0.0016778573322634 0.1401134427371043 0.1244185541490247  
0.2815082861852542 0.1404651654948395 0.1248958196450934  
0.8146737354968423 0.7666026364862970 0.1555221296758922  
0.9509975020382908 0.7609358986749678 0.1420134236613450  
0.1378017749273137 0.1325067128178941 0.1412230930299194  
0.4318577268297432 0.1416643712229519 0.1284589784886557  
0.7162704664216886 0.2910213877014436 0.1322319504876132  
0.5711869366422108 0.2859971813776236 0.1390174415368621  
0.4319056026373628 0.2902081208344401 0.1287208291929785  
0.2872380333587808 0.2831751858867361 0.1211512178160415  
0.5671313483095575 0.1418905905539823 0.1296134041059117  
0.0012832837120150 0.2898928129667945 0.1274790270153781  
0.8525813971170411 0.1409556100408573 0.1273357127577012  
0.7170696198950322 0.1415140671248471 0.1287038926026275  
0.8569972187391964 0.2850620349574229 0.1368388293662786  
0.1392309964004635 0.2827355377987352 0.1203552043604647  
0.0009377630667987 0.4250763447214775 0.1281617124030287  
0.8091762444389266 0.6195454669225177 0.1616460545292554  
0.4285385711823735 0.4279672906687904 0.1392699589681924  
0.2606048736504752 0.2119794165132267 0.2383436520560607  
0.3770349462037745 0.0477622269304671 0.1587819577618119  
0.6640594569381461 0.0473070886186749 0.1590776252868058  
0.9529961085288119 0.6196351670261084 0.1631918408677947  
0.0948078963882723 0.7656947151702410 0.1578580151706617  
0.2377424430571062 0.7615750647736318 0.1650955944201822  
0.3804606478047939 0.7616060566839514 0.1662218772970076  
0.5248796864998867 0.7623285487427324 0.1643126549539977  
0.6669215423430624 0.7614316281159847 0.1634925193928935  
0.1426436497970258 0.4275408677934793 0.1388482835298393  
0.5746106800558621 0.7199366049719685 0.1289551059265637  
0.6252253853158068 0.6665836045930118 0.2796650153573748  
0.8093646799068658 0.1892627933907329 0.1638396737877894  
0.5235154702680735 0.3344881459638262 0.1653103514162825  
0.1895765883189019 0.6609267708040271 0.2664274771820172  
0.6670086172317612 0.9044325961366919 0.1647480940775341  
0.8089686551603777 0.9029673282612903 0.1392702947519648  
0.9521754337035143 0.9052728042598407 0.1559681444539356  
0.2609480318636506 0.0474907165562710 0.2379341809896630  
0.3515745522199428 0.0480190944715419 0.2403658597652993  
0.5507712677496344 0.0477174128476124 0.2417508891649041  
0.6402122156992563 0.0471343881591108 0.2411360958256424  
0.8392973159088949 0.0477983696630591 0.2404139093148944  
0.9293773787645329 0.0474493510566384 0.2383805844733438  
0.5259587231302961 0.6202056087992869 0.1388634980185288  
0.5263992222640055 0.0476866385758729 0.1598461429522042  
0.3809081797073897 0.6176510839825518 0.1672043388241685  
0.0946626147754114 0.6159870547760842 0.1585785008011352  
0.8138853749864761 0.0476280862905226 0.1588747856788815  
0.9516847781952080 0.0463012128917547 0.1564331450009500  
0.0957798900009872 0.1905133212818869 0.1557867172164788  
0.2376154401347467 0.1907454637966570 0.1561467128628115  
0.3809325412495444 0.1904617689548760 0.1398514718835818  
0.5231508145166860 0.1898697131445949 0.1653941320468597

0.6669651010488711 0.1910611166633618 0.1415315884223912  
 0.4281767013956294 0.7133422951647703 0.1396845148500831  
 0.0948244908398342 0.3287692563078039 0.1585891578681017  
 0.3806615109969072 0.9044019169589577 0.1654228479530880  
 0.2380358826428276 0.9044527159551212 0.1363852551726944  
 0.9522650810194768 0.1902169210256065 0.1389049936107950  
 0.0957975241121721 0.9046321131445842 0.1556473181482776  
 0.6664774466684060 0.3338353193971627 0.1670922916496424  
 0.8094881310139018 0.3325326420100360 0.1653729763527264  
 0.9528401642111113 0.3330557962057520 0.1637921080305543  
 0.0947579570240405 0.4782187429923366 0.1593457279631577  
 0.2380831015499007 0.4756223750059947 0.1658412728509769  
 0.3815164336986887 0.4763770350967043 0.1663779331828064  
 0.5280569381120200 0.4794568220596011 0.1571958640849608  
 0.6675285276440602 0.4767003732318940 0.1397708998913556  
 0.8097088520279715 0.4769107596359912 0.1625148164360023  
 0.9513789185050889 0.4754800122337719 0.1396293738658179  
 0.2383531113890760 0.6186655241401462 0.1398628365417635  
 0.8166523108450809 0.7188492112930848 0.3490864296622273  
 0.7233329983643624 0.6239099327110883 0.3561469022785854  
 0.6808301186534457 0.5791178404686891 0.4297219929102668  
 0.7306478191685822 0.6265834325324361 0.5015038694867702  
 0.8188964375235332 0.7165866689282149 0.4975799976387704  
 0.8061076469009556 0.8090121153730225 0.4242550173051239  
 0.7644003361964362 0.7679898035027637 0.3500639843559045  
 0.6708799958333580 0.6750796957736912 0.3576469555591080  
 0.6282945917811400 0.6303585229059301 0.4314957028051852  
 0.6776778682947818 0.6776214191185753 0.5035179945201480  
 0.7654849422165992 0.7679178858522305 0.4995312800895321  
 0.3773164424773371 0.3291727275878489 0.1599131916034240  
 0.2382174562770165 0.3332334514292292 0.1372284987789272

W

0.7432976954542166 0.6941711085454866 0.4283413332244371

### Small surface models with $\text{WSi}_{12}$

#### Site E $\text{WSi}_{108}\text{H}_{16}$

Lattice vectors

15.360099999999999 0.0000000000000000 0.000000000000  
 -7.6800299998949999 13.3022000000360006 0.000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 25.000000000000

Fractional coordinates

H

0.7508671570194290 0.7517956401907960 0.0338525326410407  
 0.0002337602268406 0.7501252965151285 0.0338567669544652  
 0.5002734237715009 0.2494545184477417 0.0338292083139328  
 0.5009302683722111 -0.0000394283052771 0.0338483616909352  
 0.7507310669918218 0.0017061611512386 0.0338613862527630  
 0.9986263429509965 0.2494610032962762 0.0338615187497554  
 0.2481007272802696 0.2493232956540389 0.0338541816716202  
 0.2494951757185505 0.7496553924642331 0.0338473743490294

0.2497425626233983 0.0000175231596417 0.0338475944121811  
0.0002445196308915 0.4997288636256904 0.0338587692474282  
0.2477970459646246 0.4988119182393308 0.0338497881532894  
0.4993427779409624 0.4999619976077342 0.0338473264142429  
0.7505151274186868 0.4994368668487066 0.0338505983764618  
0.7510337960151255 0.2494160054332893 0.0338558121254470  
0.5007660157466164 0.7516989815458041 0.0338314426815637  
-0.0005235740475453 -0.0002053711596222 0.0338577504578755

Si

0.0871599347634109 0.1690129319339637 0.3484380896865352  
0.3297657606889347 0.6722814459197449 0.3487088912358167  
0.8227557418038315 0.4056313705197576 0.3487473947661781  
0.5806784161092465 0.4197699758190649 0.3398703005595920  
0.5921478030354255 0.1764319601199633 0.3522420242665256  
0.0856070065037621 0.4181332404362566 0.3488297372595556  
0.818027777228673 0.1590406955815955 0.3513060673476185  
0.8321022942596709 0.9162930492721946 0.2527722935862252  
0.3374914453860819 0.4189164236685463 0.3385349950285892  
0.0985108115402545 0.6743763058701815 0.3513077094593632  
0.5808795924258819 0.6642000791358957 0.3404442290589083  
0.5822712694912525 0.9165136614173023 0.2540460226546452  
0.4166655298609996 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.0815795161352095 0.9154566297924059 0.2536645821209255  
0.8312829791578116 0.6648184989477152 0.2507747662828815  
0.5814325740089101 0.6667175915784539 0.2473554662349385  
0.3327959577010323 0.6677513639362380 0.2535139786488684  
0.3300875739969673 0.1567953754321813 0.3462237930623602  
0.8308664146418444 0.6630226785203334 0.3456462995572757  
0.5932171965473786 0.9207128819361913 0.3507779816284499  
0.3227339231347078 0.9118211388633974 0.3514709953903690  
0.7479394355071068 0.7480994196805199 0.3730786148992768  
0.4993090529192175 0.7477329726872632 0.3758975047800866  
0.0039405164328266 0.7520225410736141 0.3586127073568793  
0.9151808953621833 0.0831684537578283 0.2208223561431518  
0.8316156032595862 0.4161754280382533 0.2532143608634763  
0.9968590499641153 0.5026044036033998 0.3591538293193173  
0.7510117277663311 0.2505116811302791 0.3955750569823818  
0.4973617452173670 0.2565006590145389 0.3758006929429232  
0.2596600905102607 0.2543039483993988 0.3729431213106700  
0.9916142008901965 0.2457963106277105 0.3594505538054531  
0.0814890738785169 0.6663839159153172 0.2538839198700946  
0.4970844119310965 0.0005234825069807 0.3583798631359804  
0.2553937533801653 0.0037859975176507 0.3954065577272716  
0.9974420479922042 0.9959062030604436 0.3592497235997483  
0.8236541099502802 0.9198390304665669 0.3481582003222646  
0.0980163568501175 0.9245652571879186 0.3508960213002472  
0.7432452659152123 0.4963134255338437 0.3785779335472838  
0.3927616482713421 0.2917238754622024 0.5254625851378267  
0.3333764422209637 0.4173614850153730 0.2461091804050057  
0.1666662404090005 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.9166640884330022 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.6666647989810031 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.4166655095289968 0.3333333082039971 0.1254143348740016

0.2553576197277674 0.7528124207937207 0.3959448165830353  
0.3342739371991914 0.9172682387212681 0.2548403602319253  
0.6666647786490003 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.4166654891970012 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.1666661997450021 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.7499979293509966 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.4991401688217577 0.5011022635247638 0.3774406184534356  
0.2570483267502411 0.5024043506720396 0.3755297433744639  
0.4999986398989975 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.1648805165303947 0.3327821023058600 0.2192647335161373  
0.2499993504469984 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.0000000609949993 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.4999986195670019 0.4999999623049973 0.0940607511560003  
0.2499993301150027 0.4999999623049973 0.0940607511560003  
0.0000000406629965 0.4999999623049973 0.0940607511560003  
0.7499978886880001 0.2499999811530031 0.0940607511560003  
0.4999985992360010 0.2499999811530031 0.0940607511560003  
0.2499993097840019 0.2499999811530031 0.0940607511560003  
0.0000000203320027 0.2499999811530031 0.0940607511560003  
0.7499978683559974 0.0000000000000000 0.0940607511560003  
0.4999985789039982 0.0000000000000000 0.0940607511560003  
0.2499992894519991 0.0000000000000000 0.0940607511560003  
0.1666662200769977 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.6653720647646879 0.5832629852419059 0.2182515849083446  
0.6666648193129987 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.4161994507883116 0.8339400582968208 0.2207057621498509  
0.0828906718586014 0.1660549555350052 0.2515949899272385  
0.0827997409435863 0.4173281027659517 0.2518598272775031  
0.5819337104562794 0.1666611438151302 0.2548177023803960  
0.3330506656615485 0.1649667989561544 0.2518493181517266  
0.8330866501900914 0.1667604920199934 0.2550811406356795  
0.9155461327533359 0.8329311555055101 0.2207574607336450  
0.6661346019075148 0.8349909901404385 0.2194330766884712  
0.1672019699782428 0.8336959558936659 0.2209114492452503  
0.1666662607400013 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.9157839918696831 0.5822025823679835 0.2204212492672080  
0.9166640681009994 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.7503712267259784 0.0012432156436041 0.3961142910187582  
0.6783568071170410 0.5868981498942983 0.5114927376974362  
0.4143382286249905 0.5849555464232434 0.2184002283216639  
0.1668064302287103 0.5848566341071852 0.2204098294277675  
0.9149832704165155 0.3324815919510838 0.2210626080931435  
0.6659464592734419 0.3318510340523183 0.2195113240840073  
0.4147787473622609 0.3305933261830288 0.2185421610524392  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0940607511560003  
0.5821668820316891 0.4165014642953283 0.2472684580162558  
0.7499979090190010 0.4999999623049973 0.0940607511560003  
0.4166681294031161 0.0822747030779250 0.2203211576952672  
0.1664359085700546 0.0820957394497086 0.2200726076137806  
0.9166641290959987 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.5126745588616410 0.3427147606228262 0.4587707481617190  
0.6666648396439996 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.6657673096287755 0.0835476711165439 0.2214650809794250

0.9166641087649978 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
 0.3065086675127747 0.3232327783513068 0.4591855213240567  
 0.3138561062137767 0.4783183929731499 0.4592994343942247  
 0.3369912696048186 0.5068985683373697 0.5503114614147639  
 0.5219195848148078 0.6860029008528119 0.4592613246032126  
 0.4937780654713830 0.6521765101037087 0.5489330117850383  
 0.6837204328640670 0.7123076154537080 0.4600999460379397  
 0.4252628855898645 0.4284850982710480 0.5771951515138524  
 0.6849508548288517 0.4560408684781187 0.4692582382567826  
 0.5806162422941437 0.5756521311612246 0.5835120038074050  
 0.4166655501920005 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
 W  
 0.4888703904356945 0.5022877240138042 0.4812597648058844

### Site F WSi<sub>108</sub>H<sub>16</sub>

#### Lattice vectors

15.360099999999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
 -7.6800499999999996 13.3022368046690005 0.0000000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 25.000000000000000

#### Fractional coordinates

##### H

0.7415343326772829 0.7325604452761196 0.0300292927938850  
 0.7611775281527583 0.0233754356829291 0.0334654590858088  
 0.0106790179537932 0.0227399440996816 0.0334462763229925  
 0.0124073590839267 0.5247544885063241 0.0335919240268465  
 0.9913309877306334 0.7322682214478581 0.0300752435061182  
 0.2624213914884277 0.0228107754607081 0.0334480154637829  
 0.5126423021509297 0.0233359969411424 0.0334531408722375  
 0.4918569083350200 0.7332609247464361 0.0299743085930767  
 0.9903564414146923 0.2317495277693020 0.0300512929394549  
 0.2624714440736201 0.5246127003752042 0.0335796594926857  
 0.2414762156979013 0.7327429176257861 0.0300482698407220  
 0.4918087522239944 0.2316781411448426 0.0300267464442430  
 0.5123963088961544 0.5245353253721662 0.0335424341519658  
 0.7409450024690017 0.2314831273737657 0.0300263655208791  
 0.2403843830310416 0.2302915312890504 0.0301655915494999  
 0.7627541960226445 0.5246645617271254 0.0335513543352406

##### Si

0.8320633671791009 0.9114094796612281 0.2476468149983551  
 0.5463246610434358 0.0937464610759570 0.3884173609358194  
 0.7971844475495294 0.0937450338453076 0.3883074373056521  
 0.0528979974577514 0.3495642771170731 0.3347134561621011  
 0.0469148629303839 0.5895124309605565 0.4065617143975685  
 0.5470170589711892 0.3494529086460989 0.3347368855581476  
 0.7995663795893727 0.3488365039703351 0.3392011777783245  
 0.3006496700719919 0.5956638124634867 0.3930032759681141  
 0.0539409587716487 0.1015100994876673 0.3948705358871617  
 0.3001406354506653 0.3499007872816352 0.3355167707085875  
 0.5451776462768638 0.5955022582628263 0.3931465008194742  
 0.7922348707827734 0.5891008175369549 0.4065548341099968  
 0.1164473658421158 0.7298372644381806 0.3429962902675278

0.0790696751809489 0.9075596988284994 0.2489113439323610  
0.8378112451171442 0.6758888313056235 0.2517815361379854  
0.5889729309174936 0.6769115310747037 0.2495673348321654  
0.3383886304507852 0.6770231777049736 0.2496641079783486  
0.2971316542361055 0.1015809898927614 0.3948926581925048  
0.5814596920207405 0.9124046983107565 0.2468407960653105  
0.5465978633097744 0.8427277030603210 0.3366328874865810  
0.2938867086009526 0.8440379995372622 0.3381532011575616  
0.8634475049249094 0.7296515491275366 0.3430741466938756  
0.6219835086833682 0.7407150522486383 0.3384397566953509  
0.3298057342653701 0.9114244208223421 0.2476222397305481  
0.4180245539949965 0.5857185818530013 0.1287343515050026  
0.4786993721744245 0.3955082404921595 0.4631261496120232  
0.3665529822850703 0.4829711511287790 0.4000787259018269  
0.1248520700683172 0.4860498439830037 0.3956460414237169  
0.8744465287769116 0.2455055822485037 0.3381949148665835  
0.6213635990800133 0.2453663687852252 0.3382203215842938  
0.3691407810420702 0.2409932001675795 0.3354383979071017  
0.1221453881510576 0.2409241375228764 0.3353451523544078  
0.0885808373484622 0.6758142275585439 0.2517481458815618  
0.6290290088709023 0.0081882729533074 0.3672993548749154  
0.3778848382665035 0.0099192980613855 0.3722492386521866  
0.1276459758817169 0.0056419599220524 0.3731842280020451  
0.8000899155993516 0.8437495078500448 0.3381333128542207  
0.0436611126687351 0.8372774273018957 0.3398884820762035  
0.8811296008821762 0.5122648734081418 0.3767565295864452  
0.0041062495339972 0.0078964232139995 0.0931173245020034  
0.3313976229778673 0.4121670199232375 0.2456895773813180  
0.1680108132869975 0.5857083864019970 0.1287582686289994  
0.9185320824330034 0.3367574497730033 0.1150396800429974  
0.6685415386809979 0.3367490972599967 0.1150241353100014  
0.4185473662629988 0.3367394798370000 0.1150403708929986  
0.3692100551299226 0.7411479139929319 0.3385022299198961  
0.9180510350869966 0.0858009937370028 0.1287288213089965  
0.6680670457149986 0.0858022198669985 0.1286895625850022  
0.4180686884909974 0.0858039907179986 0.1287064093369992  
0.1680571303709968 0.0857959660850014 0.1287361853789974  
0.7490348769660002 0.7477119303170028 0.0896724435449983  
0.6106080487859062 0.4854450231382508 0.3959867785189473  
0.4990313977870002 0.7477102202069972 0.0896596308219983  
0.9177569759093999 0.0857906330801374 0.2242456692955682  
0.2490200146620012 0.7477162391580023 0.0897050242019972  
0.5809578196980368 0.4120207502706886 0.2451299878943026  
0.5041101933139984 0.5078985908070024 0.0930814651690000  
0.2541009166640009 0.5078942512829983 0.0931145152230002  
0.0041064904240002 0.5079058633359992 0.0931203440550021  
0.7490138763039980 0.2477153781820007 0.0896003935970029  
0.9182621468717680 0.5860498957481270 0.2248426563713664  
0.2490164492139968 0.2477073666780001 0.0896459133509993  
0.9990090533040004 0.2477188852190011 0.0896343676149982  
0.7541148775110003 0.0078744099930006 0.0930815517340022  
0.5041065584929996 0.0078924307989965 0.0930736606499991  
0.2540918829029977 0.0078826994979977 0.0931126404899985

0.6684483666591658 0.5858974389641853 0.2239562836039621  
 0.9990035393729997 0.7477058914000025 0.0897047135240001  
 0.6680160580860033 0.5857107277560019 0.1287359362559997  
 0.0888272092779737 0.1757291091312435 0.2479215253870909  
 0.1685399448059997 0.8367486391829999 0.1151963121009985  
 0.1673589488534114 0.8343822527408565 0.2095459467182711  
 0.6693237000479763 0.8370686626607221 0.2092593447457251  
 0.9176069206991282 0.8344712738705871 0.2095678712028731  
 0.4182558399992287 0.8371084281171518 0.2092772355712849  
 0.3375423055518996 0.1758138098535610 0.2479961060810551  
 0.5893740510047142 0.1789379355084627 0.2499302748521464  
 0.8400648184328758 0.1789951014890102 0.2498902532858382  
 0.0816152954740628 0.4119109595819292 0.2451019847771337  
 0.4990201566239989 0.2477105913339983 0.0896040752969967  
 0.1685404075140013 0.3367418548440000 0.1150597259969999  
 0.6689894158411575 0.0875356939373896 0.2246582373003216  
 0.5096387641990565 0.6221706834285090 0.4818227240097359  
 0.1679725934418052 0.5858069801646912 0.2239952857299488  
 0.9185879676791958 0.3375597134914580 0.2084449773184794  
 0.6694294061793074 0.3374838294795635 0.2084580434616900  
 0.4178814578834664 0.3360515421844987 0.2079572797149627  
 0.1688140110585983 0.3359974730854519 0.2079554716447036  
 0.8816051679062735 0.0096420898890723 0.3721627621684354  
 0.7541009659559990 0.5078971081600017 0.0930854510690011  
 0.4185479747190023 0.0857960626281427 0.2242329868629266  
 0.1665030959403258 0.0823589162327156 0.2242247936902445  
 0.9185424086799969 0.8367660541190034 0.1151920773739974  
 0.6685451140009988 0.8367373336989985 0.1151596465340035  
 0.4182211057026066 0.5861029378319349 0.2240005425574144  
 0.4185503344950021 0.8367475881790014 0.1151603971069974  
 0.9179841552509984 0.5856903941079992 0.1287510903679987  
 0.3360231171898895 0.2786515570891859 0.5576537494279790  
 0.1893537651084074 0.2786936165139162 0.5575028412428720  
 0.1767569423060884 0.4212924832959858 0.5551959178997423  
 0.3308431642932161 0.5664390542054870 0.5706275006465106  
 0.4837857560933572 0.5638274385024218 0.5695975932046480  
 0.4933274880235008 0.4186521359701116 0.5556950564621429  
 0.3241290933749356 0.2387612474761021 0.4649664968502121  
 0.1638033085866130 0.2396022889668125 0.4645389024817729  
 0.1671299132509092 0.3970658841973648 0.4627633391215720  
 0.3615121019569228 0.6212650027397145 0.4820339327257163  
 0.8313701903933424 0.4122564789523646 0.2477183307671477

W

0.3440640670432375 0.4386696441393248 0.4995350650573637

### Site G $\text{WSi}_{108}\text{H}_{16}$

Lattice vectors

15.360099999999999 0.0000000000000000 0.000000000000  
 -7.6800300000000004 13.302199999999999 0.000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 23.000000000000

Fractional coordinates

## H

|                    |                    |                    |
|--------------------|--------------------|--------------------|
| 0.7415550074807555 | 0.7294904521520920 | 0.0318946684613692 |
| 0.2366240877563897 | 0.2230379589776206 | 0.0288755440356354 |
| 0.7375868505228027 | 0.2246058045160382 | 0.0296925093713298 |
| 0.5115624619596417 | 0.5229526912488467 | 0.0351183808613840 |
| 0.4894687445093311 | 0.2252877525995061 | 0.0294480494253193 |
| 0.2384252460836933 | 0.7295574796868536 | 0.0318618490947813 |
| 0.2617470918203111 | 0.5229968335544015 | 0.0351098965721022 |
| 0.7646160872252352 | 0.5220494424175968 | 0.0361434119130024 |
| 0.4908651957289010 | 0.7316353531721376 | 0.0315590421387242 |
| 0.5089018563903238 | 0.0152313240780728 | 0.0343590961987275 |
| 0.2564642497054734 | 0.0096533828852756 | 0.0346967219092278 |
| 0.9884880837846879 | 0.7265328994364353 | 0.0335466074641317 |
| 0.0078909810414771 | 0.5221035904117599 | 0.0360796625602404 |
| 0.9865105199137574 | 0.2256389777475718 | 0.0293393976538070 |
| 0.0037367815019351 | 0.0094848028885863 | 0.0346126727240730 |
| 0.7564199745800337 | 0.0151018973301689 | 0.0343004677483378 |

## Si

|                    |                    |                    |
|--------------------|--------------------|--------------------|
| 0.0777770019118549 | 0.4051724866620958 | 0.2641394934068870 |
| 0.8361128253915240 | 0.1719636837101888 | 0.2696243021511435 |
| 0.5865649471276342 | 0.1720146323371239 | 0.2696632026786645 |
| 0.3348382505136129 | 0.1704017762970835 | 0.2661754213871106 |
| 0.4147977894835932 | 0.8314875745360411 | 0.2270925952136054 |
| 0.9155554567304094 | 0.8294756842257911 | 0.2288294342254176 |
| 0.6671155060547704 | 0.8313276750684437 | 0.2270271697767186 |
| 0.1645317319492747 | 0.8295172809112685 | 0.2288468067090434 |
| 0.1650994198532061 | 0.8297221930125573 | 0.1269635335284605 |
| 0.0860091476630984 | 0.1703094484398022 | 0.2660540432183467 |
| 0.6657818174660903 | 0.5805897477888990 | 0.1386963554573768 |
| 0.4967293132909489 | 0.2422184342206464 | 0.0942969446073576 |
| 0.9960238231297325 | 0.7416459649444889 | 0.0984754898900277 |
| 0.2505904541853710 | 0.9996099822445075 | 0.1000338775884231 |
| 0.5014857263870169 | 0.0018381875846458 | 0.0995084977187872 |
| 0.7506841908031774 | 0.0017807322510990 | 0.0994432471326334 |
| 0.9959651554319962 | 0.2422536353406670 | 0.0942165740183469 |
| 0.2456287175741210 | 0.2408931546545077 | 0.0936521026596040 |
| 0.9151124059314668 | 0.5795540893694877 | 0.2453386769543116 |
| 0.7461019275642968 | 0.2417323646293283 | 0.0945369336559878 |
| 0.0006945951982260 | 0.5029391816077293 | 0.1007017451195011 |
| 0.2521838054469256 | 0.5035237708750131 | 0.0997383734235413 |
| 0.5017259736872575 | 0.5034878126533968 | 0.0997421193091981 |
| 0.5779964196721608 | 0.4052339242493943 | 0.2641253032112303 |
| 0.6660988100691441 | 0.5800356034913676 | 0.2426402853228780 |
| 0.6654713969660904 | 0.0803088817116162 | 0.2422781992856997 |
| 0.4161808942392540 | 0.5818929859990405 | 0.2430895732060918 |
| 0.1572698346698544 | 0.2223345521419731 | 0.6053554044588125 |
| 0.1570470084680409 | 0.3743292392422362 | 0.6110496008359121 |
| 0.3084595703693225 | 0.5267156250243161 | 0.6177253866133512 |
| 0.4608136059803130 | 0.5263282510142488 | 0.6191068957521964 |
| 0.4608041891425358 | 0.3748458894075810 | 0.6123441419822200 |
| 0.3289931564355513 | 0.2261544563240605 | 0.5042017419284122 |
| 0.1438519305988493 | 0.2241169910357002 | 0.5037760730940803 |
| 0.1491043474324414 | 0.3815717684707423 | 0.5084524631956313 |

0.3292629279969930 0.5567939475923112 0.5153799395327638  
0.4792628136472317 0.5561561987526389 0.5165534391519984  
0.4816471363605714 0.3845514930896030 0.5100139084084603  
0.9154101067396141 0.5803754991666636 0.1413106401308895  
0.8278325839728140 0.4050395225027970 0.2672527306470300  
0.4155002900223863 0.8316262553462721 0.1251974911121749  
0.6664619388211577 0.8315607007339594 0.1251248037536428  
0.9150417396077373 0.8297277770146465 0.1269437730294882  
0.1639255544503442 0.0773156611012809 0.2401055383487574  
0.4160723787136007 0.0802545304171005 0.2411043182509971  
0.7526422634707615 0.5029165458881621 0.1007554871460172  
0.9147151319662115 0.0802053100136604 0.2409333211179927  
0.1652887504127349 0.3307311405701796 0.2224775234937084  
0.4159957218579535 0.3307208667274395 0.2224368063004150  
0.6665711151224016 0.3304982132254111 0.2241280728076731  
0.9145142342231196 0.3304905065997161 0.2241368140338267  
0.1645236637456264 0.5799684837104451 0.2426488580055235  
0.2462163611287735 0.7426924131221071 0.0969821253701468  
0.1660558721905971 0.3311161641391323 0.1208761879159894  
0.4972192952248946 0.7441280486867825 0.0967228328700998  
0.3664015586681302 0.7386237589539348 0.3674988981419531  
0.6226265619830613 0.7383894231476802 0.3675235027125723  
0.8696265857805869 0.7369724340732375 0.3716659475510085  
0.2957184818302494 0.8465752274160607 0.3684532067212842  
0.5439033578111605 0.8371282761658847 0.3655174678327029  
0.7823935243484073 0.5688301191758640 0.4087610906581673  
0.2853460561646131 0.0955354959208847 0.4302412678786922  
0.3348404585952451 0.6718865900282722 0.2710851470752829  
0.5875080372122881 0.6717533179149768 0.2711022539037486  
0.8352701287367736 0.6701132373984535 0.2744564488110299  
0.0778421943737371 0.9050673869307957 0.2701242317604269  
0.1180370362868004 0.7366329116933343 0.3716317885987195  
0.3278236668484524 0.9071689919504919 0.2687931322888844  
0.5428884914821026 0.5848884563914112 0.4197798433519466  
0.0600608650816739 0.0943989010960422 0.4296281226809242  
0.8298454304116518 0.9071438443838105 0.2686486152959162  
0.5449708881295052 0.0886931980831562 0.4216955371402449  
0.7943641265107502 0.0887348561267984 0.4219796135034031  
0.0460827690322674 0.3389496696205114 0.3606559501814957  
0.2921564619614472 0.3339276309714307 0.3607200387625227  
0.5439173545688760 0.3394395600176665 0.3607686362759210  
0.7965486511704896 0.3420930398019735 0.3653205827787360  
0.0368534813063164 0.5690667690361906 0.4098280828772403  
0.2927223740906015 0.5848315715888077 0.4192638329557496  
0.5780692054451464 0.9055276789153339 0.2673730367115965  
0.4163283748340021 0.5822400513750523 0.1386469710727951  
0.8678412909088422 0.4852043689268868 0.4277178857462687  
0.3765085781725901 0.5018915074593764 0.3869973313387405  
0.7468624985118240 0.7426393607107187 0.0969901463778484  
0.1646281586597524 0.0788628730148915 0.1364506071697207  
0.4157900159333394 0.0803892631505150 0.1371998185973524  
0.6654582739295520 0.0804759249804690 0.1380738147042990  
0.9149965228604060 0.0803508215594633 0.1370297137656777

0.3099867470325890 0.2227931659831057 0.6056453577338630  
 0.4154385998669738 0.3310601405163851 0.1208181325145361  
 0.6660719075717836 0.3309001503388274 0.1224774780414890  
 0.9153159937295854 0.3309273548306564 0.1224803557436687  
 0.1652223566747679 0.5806038001146092 0.1386807824139424  
 0.3281554008751471 0.4057661128432741 0.2636877078002513  
 0.6079848519875597 0.4744970263270432 0.4278737173818143  
 0.9994530651554001 0.9995804092228013 0.0999532439372857  
 0.0499933803714612 0.8489406499191787 0.3707653307462309  
 0.8012369187888595 0.8463240093974989 0.3682672398409039  
 0.1136078928097106 0.9762465199549837 0.4472399833260141  
 0.3755460208687538 0.0097231515348568 0.4121417310841125  
 0.6270567853739379 0.0033069863404407 0.3972682810456902  
 0.0855268273603755 0.6701042900157290 0.2743965772161943  
 0.1148487425036109 0.2302303990712815 0.3621133848472411  
 0.3662402842407886 0.2306168709691292 0.3622421734940815  
 0.6191691459521138 0.2373778426066195 0.3657637385264394  
 0.8688607288621881 0.2371034633627929 0.3657546079761147  
 0.1176715757453763 0.4744829140086111 0.4272998500993381  
 0.8843376149246254 0.0093881813125307 0.4116733136363067

W

0.3148425285303276 0.3854556565828986 0.5575978748668433

### Interstitial site E WSi<sub>108</sub>H<sub>16</sub>

Lattice vectors

15.360099999999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
 -7.6800299998949999 13.3022000000360006 0.0000000000000000  
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 25.000000000000000

Fractional coordinates

H

0.7510276546366818 0.7502817836740545 0.0339342820989461 T  
 0.4983846760750158 0.2474868619440279 0.0338929151041838  
 0.2496420955695501 0.9979789965931551 0.0339538742335661  
 0.4998201233899208 0.9996677760462950 0.0339426511893306  
 0.7512574057102898 0.0006244133233569 0.0339385930537076  
 0.0013256112530393 0.2499236324074704 0.0338911170858715  
 0.2482523752039905 0.2483588959621559 0.0339387596712556  
 0.0018128489471178 0.7523026873337352 0.0339118885267221  
 0.0013533180880044 0.0005367356894095 0.0339398860602056  
 0.0003283327952630 0.5010837040937187 0.0339445490916566  
 0.2483063322895892 0.4998402092822738 0.0339422825816807  
 0.4980128702272210 0.4986598164513371 0.0339335032574853  
 0.7518316425654229 0.5002976345346991 0.0339453800158868  
 0.2489453070072943 0.7503052361656732 0.0339413143929402  
 0.7509561161009536 0.2518222902429355 0.0339543114236066  
 0.4998622620999187 0.7513241298209391 0.0339190431678349

Si

0.8342119162763021 0.9189284766003698 0.2492242013815387  
 0.5880280544613020 0.1733189803317824 0.3475633213103410  
 0.8415967087847711 0.1642119589379498 0.3477319397805770  
 0.0789335754869084 0.4035525348490157 0.3506576499350345

0.0679458143694312 0.6561603328878528 0.3552081143092976  
0.5762825493229262 0.4173948715327090 0.3449411642850322  
0.8368147566292846 0.4151009060783276 0.3313157626838833  
0.3367127943991383 0.6642823187837440 0.3492825385701024  
0.0872157587200289 0.1756366768645810 0.3523834101735223  
0.3353794593197463 0.4147507727589619 0.3397917696712557  
0.5812313944485532 0.6631418167946740 0.3435233728848754  
0.8196313171961617 0.6625880182408321 0.3433625132733065  
0.9738362298512784 0.7314047543184943 0.3875817555690704  
0.0807284494761822 0.9143516840717358 0.2577122305529271  
0.8288451699822769 0.6657413959965263 0.2495988783348844  
0.5823889178915623 0.6657079264065210 0.2502538751106165  
0.3336081724471178 0.6663702235633812 0.2530127699988794  
0.3353635230607982 0.1580296000742614 0.3532079364537703  
0.5841088489140590 0.9184324018123693 0.2511968934962674  
0.5948473194909918 0.9188103888237252 0.3460219732865277  
0.3260745023670885 0.9203199481987392 0.3499326393501552  
0.7479734730245937 0.7665863405797012 0.3700768417332659  
0.5067808996852728 0.7527839760402268 0.3800504303865451  
0.3331499944634547 0.9159046932428094 0.2527818114778325  
0.4166655298609996 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.4752561571071351 0.6124081326710915 0.4814380532580538  
0.2514293247017106 0.4941232479106611 0.3771864021726679  
0.9886456131054613 0.4834507995479829 0.3786051445841595  
0.7601711483710722 0.2537220336986869 0.3714509981556893  
0.5074682941330114 0.2565840013501619 0.3844104889085513  
0.2595547190944764 0.2528032247913693 0.3776868875431084  
0.9971688111406812 0.2462193468169448 0.3940451259002476  
0.0822727453573925 0.6656263023395038 0.2563409848536211  
0.5013846819950525 0.9986271834022609 0.3568383228144477  
0.2501033069094381 0.9977086531583497 0.3982086120271239  
0.0058832613853535 0.0015256719017138 0.3572393376558841  
0.8345508947950968 0.9344184623888691 0.3432936496482282  
0.0862880760103107 0.9081499645913533 0.3571774503391681  
0.7419842054740806 0.4805520609034219 0.3719558025906433  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0940607511560003  
0.3360755584065648 0.4167762100677636 0.2470522132264677  
0.1666662404090005 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.9166640884330022 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.6666647989810031 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.4166655095289968 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.2446319834286752 0.7461456296230425 0.3622846074899196  
0.9166640681009994 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.6666647786490003 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.4166654891970012 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.1666661997450021 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.7499979293509966 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.4665196410056827 0.4834332965659408 0.4045461229650030  
0.4999986398989975 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.9203128892151995 0.0863419283898974 0.2197491871870774  
0.2499993504469984 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.5812957320665689 0.4171325356587267 0.2511791136111493  
0.4999986195670019 0.4999999623049973 0.0940607511560003

0.2499993301150027 0.4999999623049973 0.0940607511560003  
0.0000000406629965 0.4999999623049973 0.0940607511560003  
0.7499978886880001 0.2499999811530031 0.0940607511560003  
0.9179290587591257 0.5869316488627961 0.2191137171535688  
0.2499993097840019 0.2499999811530031 0.0940607511560003  
0.0000000203320027 0.2499999811530031 0.0940607511560003  
0.7499978683559974 0.0000000000000000 0.0940607511560003  
0.4999985789039982 0.0000000000000000 0.0940607511560003  
0.2499992894519991 0.0000000000000000 0.0940607511560003  
0.6636284029335432 0.5818563282774932 0.2182757832397800  
0.0000000609949993 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.6666648193129987 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.0860426566633205 0.1667875292570339 0.2548710862954953  
0.1666662607400013 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.1649939287859679 0.8323262452783973 0.2219916345166117  
0.6660687591270330 0.8331785911205536 0.2194666123897569  
0.9173066186072991 0.8342115227737867 0.2203157886764086  
0.4166766131727116 0.8329850375204338 0.2205581462335991  
0.3353483369851278 0.1655027266036124 0.2567062452472343  
0.5848835965998544 0.1659913495542737 0.2517786773364355  
0.8356076178379762 0.1669665367428916 0.2533786117889509  
0.0850978044009036 0.4170152172110770 0.2550502435444126  
0.4999985992360010 0.2499999811530031 0.0940607511560003  
0.1666662200769977 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.6698551120232247 0.0847445610136238 0.2198011331916269  
0.3176437741961403 0.4831122599711303 0.4621573525492296  
0.1661559685798897 0.5829027022962409 0.2216737033257294  
0.9204860975877707 0.3318527108079340 0.2190461920567593  
0.6630437749869983 0.3322373268409591 0.2188309677954007  
0.4157981114641403 0.3291807664992288 0.2190897213857443  
0.1666442280725392 0.3331074841933406 0.2202820326014891  
0.7517718852936155 0.0050579508539794 0.3920820893216144  
0.7499979090190010 0.4999999623049973 0.0940607511560003  
0.4171144871345177 0.0832509362559291 0.2206354814026735  
0.1682307317227813 0.0819177428834551 0.2226093274162230  
0.9166641290959987 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.6666648396439996 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.4167161012478013 0.5839194673260033 0.2186595574330062  
0.4166655501920005 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.9166641087649978 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.8489140734960720 0.3780320301267415 0.4388506451417444  
0.8290564973271293 0.6154695161544063 0.4561251707407031  
0.5688854312094551 0.2783557748788519 0.4764460946967936  
0.7391300455118497 0.4352235633215391 0.4653632467839126  
0.6840456917035179 0.7530621643101753 0.4553016779273556  
0.5731999114725127 0.5396005982582416 0.5029484622933725  
0.3236462459836283 0.3316101798062546 0.4627572539627782  
0.7386300478751804 0.6668942199396654 0.5092141608687822  
0.4860110828862251 0.3698782258648203 0.4827373573358484  
0.5505477132617111 0.7868816947976552 0.4734880216340068  
0.8335644022579649 0.4164370161621050 0.2399575287644908  
W  
0.6563922179294014 0.5818764860261532 0.4059024733910093

**Substitutional site WSi<sub>108</sub>H<sub>16</sub>**

## Lattice vectors

```

15.360099999999999 0.000000000000000 0.000000000000000
-7.680029999894999 13.302200000036006 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 25.0000000000000

```

## Fractional coordinates

## H

```

0.7511577144618079 0.7504587220316976 0.0339340106188281
0.4997048284297311 0.7506597046068713 0.0339121403139922
0.7489966417075140 0.2514678062970979 0.0339702088098403
0.7519182419236703 0.5004057768131476 0.0339209025905329
0.4990180219845862 0.4996713674896225 0.0339104069366534
0.2485701370345071 0.4993388668738372 0.0339294136407282
0.9992897797336996 0.4976283996915334 0.0339645214498842
0.9992048328021460 0.0013907597642238 0.0339592820107399
0.2482825730410539 0.7498607470900601 0.0339473683022249
0.2495104777539688 0.2497870808300389 0.0339344575696500
0.0027954790841072 0.2526658058889572 0.0339418591864068
0.7508382494015442 -0.0009863988721459 0.0339445672712604
0.5011061046008269 0.0002103178348983 0.0339571953837050
0.2484828565119097 0.9985014034397162 0.0339392495274062
0.5000339310616625 0.2485864371336637 0.0339174004465846
0.0016810573873635 0.7502832027719174 0.0339456832563036

```

## Si

```

0.1666662607400013 0.8333332705090015 0.1254143348740016
0.1668670445927385 0.8334769310307453 0.2218668462315346
0.6657676199442473 0.8311809587773278 0.2188757385108402
0.9187448658428565 0.8343520635140823 0.2194148783630410
0.8314418378270803 0.1650262978573620 0.2577921368771272
0.3336825521159406 0.1662858617541995 0.2522177513393276
0.5837952428338886 0.1664390799262251 0.2469560434562129
0.0824930761358200 0.4157849262509550 0.2537412927885948
0.0839685389036765 0.1669722180106021 0.2532713302274053
0.4140482980413002 0.8312397993923939 0.2198204261715798
0.6666648193129987 0.5833332893559984 0.1254143348740016
0.9179550592248665 0.5834566118467044 0.2194957153874118
0.6653972403950648 0.5812131682865882 0.2182300019460618
0.2499992894519991 0.0000000000000000 0.0940607511560003
0.4999985789039982 0.0000000000000000 0.0940607511560003
0.7499978683559974 0.0000000000000000 0.0940607511560003
0.0000000203320027 0.2499999811530031 0.0940607511560003
0.2499993097840019 0.2499999811530031 0.0940607511560003
0.4999985992360010 0.2499999811530031 0.0940607511560003
0.7499978886880001 0.2499999811530031 0.0940607511560003
0.0000000406629965 0.4999999623049973 0.0940607511560003
0.2499993301150027 0.4999999623049973 0.0940607511560003
0.4999986195670019 0.4999999623049973 0.0940607511560003
0.0000000609949993 0.7499999434580005 0.0940607511560003
0.1666662200769977 0.3333333082039971 0.1254143348740016
0.7443815906785003 0.9893733129009965 0.3815385715840489

```

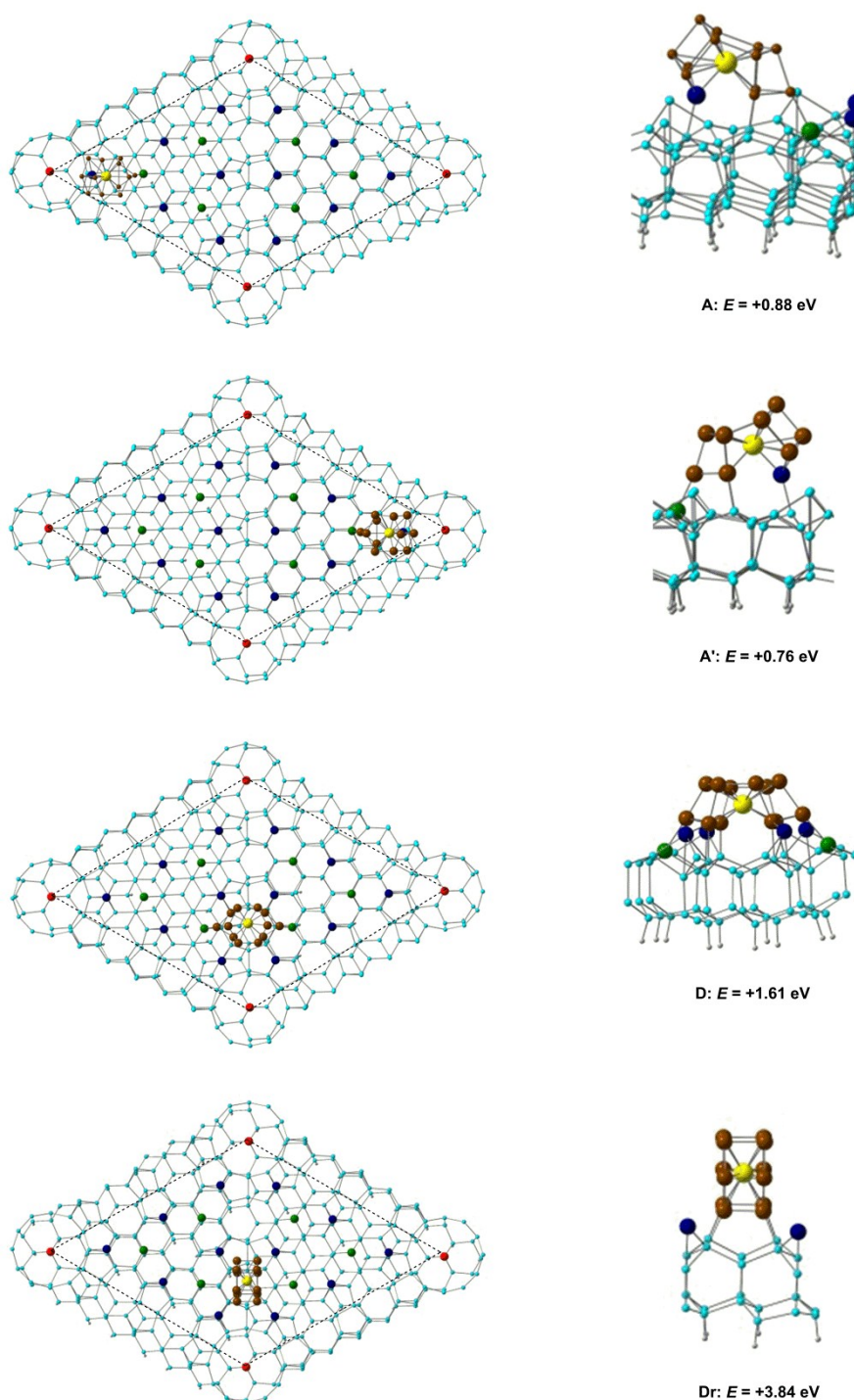
0.3255592792507664 0.4892195703934750 0.4547893356258358  
0.5556568031632603 0.7190948572009638 0.4528605309096309  
0.4890364815624735 0.3806090622676414 0.4778443164229851  
0.6793656317205923 0.6173918774183559 0.4658058457182556  
0.3294795714648487 0.3410940131646985 0.4507547362313148  
0.5559606900157691 0.5247017763899282 0.5291742480284229  
0.7408605109000099 0.7898525051602887 0.4591806002928475  
0.7391859822865591 0.4451871265329277 0.4704050596873208  
0.5688729635046916 0.2906434935965928 0.4534582054474105  
0.8351443739963241 0.6142923908384459 0.4538929996100254  
0.7145260879250303 0.2812926730218751 0.4724958364675229  
0.9166641087649978 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.6689934511722405 0.0836048062669007 0.2194033160369145  
0.4166655501920005 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.6666648396439996 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.9166641290959987 0.8333332705090015 0.1254143348740016  
0.1665302813676320 0.0826033894435113 0.2208600313066007  
0.4149296234774795 0.0815935255013119 0.2196427345092085  
0.7499979090190010 0.4999999623049973 0.0940607511560003  
0.5816164939567520 0.4202611936979887 0.2572124378856875  
0.1691754846586837 0.3346920529575544 0.2213646893281107  
0.4185935328994784 0.3329529583630148 0.2198106399582658  
0.6641620984026761 0.3363364085950444 0.2204473233901848  
0.9155873411564435 0.3302013461722177 0.2209477506321279  
0.1656887560364546 0.5824172002633616 0.2207383360915616  
0.4164298902418506 0.5831911687550868 0.2191578593385866  
0.2499993504469984 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.9166640681009994 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.4999986398989975 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.3353335696570045 0.9170537241353476 0.2547522777228329  
0.4966275868752791 0.7406770398579269 0.3707102905584059  
0.7562923245368116 0.7586227607678749 0.3675785143363124  
0.3184604402539118 0.9092005569130438 0.3522999185141979  
0.5827154912403140 0.9116898794338101 0.3426383610566268  
0.5821032770893643 0.9152330396695586 0.2484447115009022  
0.3277324541211134 0.1566838239134425 0.3469041934223253  
0.3323728321135902 0.6650623468568186 0.2526256695464499  
0.5827013336107085 0.6637755053884247 0.2499485454778346  
0.8323153787107755 0.6659159302303500 0.2477647964225804  
0.0826269827448746 0.9167178029168959 0.2557228371560852  
0.4166655298609996 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.9903327857194323 0.7414554120941563 0.3847363485394715  
0.5871579675372504 0.6577123372223146 0.3431773462060350  
0.3557425321700966 0.4329964603785280 0.3473455442660915  
0.0833003105665180 0.1783010100553779 0.3502188345978761  
0.3260695472951570 0.6662539208542063 0.3472917494584233  
0.8268889973248020 0.4134843203567218 0.3441673340019724  
0.5715421749811023 0.4326051327080515 0.3547527209454191  
0.0880788219762629 0.6723620495874590 0.3516629327554809  
0.0765999968965713 0.4021689226067934 0.3506012289436617  
0.8329572210190952 0.1639839862897652 0.3554525585281738  
0.5834746159771000 0.1680654315121158 0.3406699416721208  
0.8345899103617228 0.9193175045469338 0.2460919034119969

0.8359147722287272 0.6682443400679617 0.3408535684740729  
0.9177450449854490 0.0876794407037429 0.2199186613922656  
0.4527320578462852 0.5928794339276671 0.5121594785954616  
-0.0000961941244785 0.4990543817860297 0.3580003126044780  
0.6861647486686901 0.9042365567358260 0.4699074054500038  
0.7499979293509966 0.7499999434580005 0.0940607511560003  
0.1666661997450021 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.4166654891970012 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.6666647786490003 0.0833333270510010 0.1254143348740016  
0.8325420150911641 0.4156908870624251 0.2494922177666161  
0.2496299408589574 0.7479363138614554 0.3912959864051173  
0.4166655095289968 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.6666647989810031 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.9166640884330022 0.3333333082039971 0.1254143348740016  
0.1666662404090005 0.5833332893559984 0.1254143348740016  
0.2496744633784487 0.4972914251334801 0.3741473232860955  
0.3379996050822083 0.4174506695003805 0.2521816818348762  
0.7453678312042500 0.4996394747504488 0.3750912596245496  
0.0902807419776934 0.9125396906606681 0.3539532810842634  
0.8370037288740654 0.9238152110136526 0.3392364436183868  
0.0087232863788007 0.0048181936290696 0.3558436101472515  
0.2512563945451773 0.0012915185951392 0.3947255061430315  
0.4914104240978534 0.9943743543920172 0.3545507880631507  
0.0827754606986498 0.6655707059040799 0.2543393834968185  
0.9951233394778743 0.2460294740292947 0.3965080692865224  
0.2563051409456391 0.2550681063880053 0.3712170463515461  
0.5000035594813963 0.2528715660057710 0.3683363679978146  
0.7439287525154289 0.2487484262958017 0.3805029710984107  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0940607511560003

W

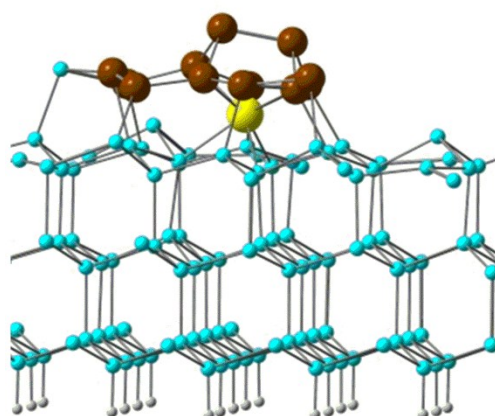
0.5007691115205049 0.5250104287918372 0.4170364903261790

# Structures of less stable absorption sites, A, A' , D and D<sub>r</sub>, on the Si(111)-(7x7) surface.

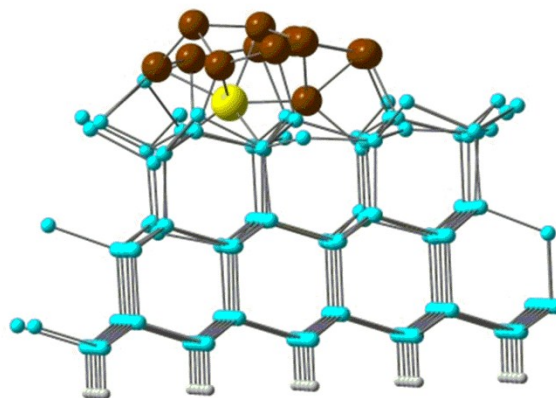


**Figure S1** Structures and energies of structures A and A' .

These structures are very similar to B and B' , but  $\sim 0.8$  eV higher in energy. A possible explanation for the relative instability of A and A' is the accessibility of only one unsaturated 'rest' atom (green) rather than two.

**Structures of 'hard-landed' clusters****I**

$$\Delta E = +0.88 \text{ eV}$$

**II**

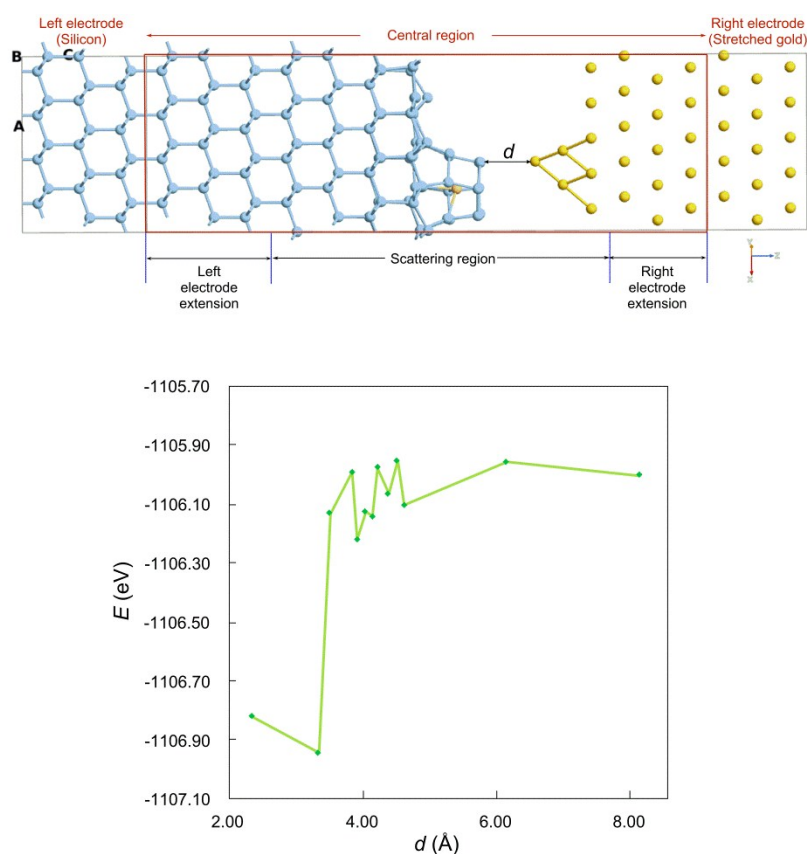
$$\Delta E = +1.02 \text{ eV}$$

**Figure S2** Structures and energies of 'hard landed' clusters where the integrity of the cluster is lost.

In the two structures shown above, the initial hexagonal prismatic structure of the cluster is essentially lost, effectively modelling a 'hard landing'. Both are less stable than alternatives where the cluster remains intact.

## Justification of the junction geometry

The selection of an appropriate model for the junction that models the STM experiment requires a number of approximations. The basic 2-electrode model is shown in Figure S2. The first issue to deal with are the dimensions along  $a$  and  $b$ . In a symmetric junction (i.e. where both electrodes are chemically identical), this presents no problem – the lattice parameters along  $a$  and  $b$  are some multiple of the intrinsic lattice parameters of the electrode material. When the electrodes are different, one or other of the lattices has to be stretched or compressed to make the lattice parameters commensurate (the chosen parameter can only match exactly one of the two materials, not both). In the model shown below, the  $a$  and  $b$  vectors were slightly larger than the intrinsic lattice vectors of Au, in order to make the Au unit cell commensurate with that of Si. Tests where the opposite approach was taken (i.e. the Si lattice was compressed slightly along  $a$  and  $b$ ) showed little difference. The second issue concerns the distance between the Au tip and the  $\text{WSi}_{12}@Si$  surface. In order to mimic tunnelling conditions it is important that the tip is not within bonding distance of the surface. Equally, the absence of basis functions in the vacuum means that the distance cannot be too large. We have optimised the structure of the device as a function of surface-tip distance (see Figure S2, below) and found that the energy jumps sharply around  $4.0 \text{ \AA}$ , marking the point where the covalent bond between tip and surface is lost. We have therefore chosen to place the tip  $4.1 \text{ \AA}$  above the surface in the transmission calculations.



**Figure S3. Structure of the 2-electrode device.**