

SUPPORTING INFORMATION

Table of Contents

1	Tables of activation energies and reaction paths	1
2	Cartesian coordinates of the reactants, TSs, and products	9

1 Tables of activation energies and reaction paths

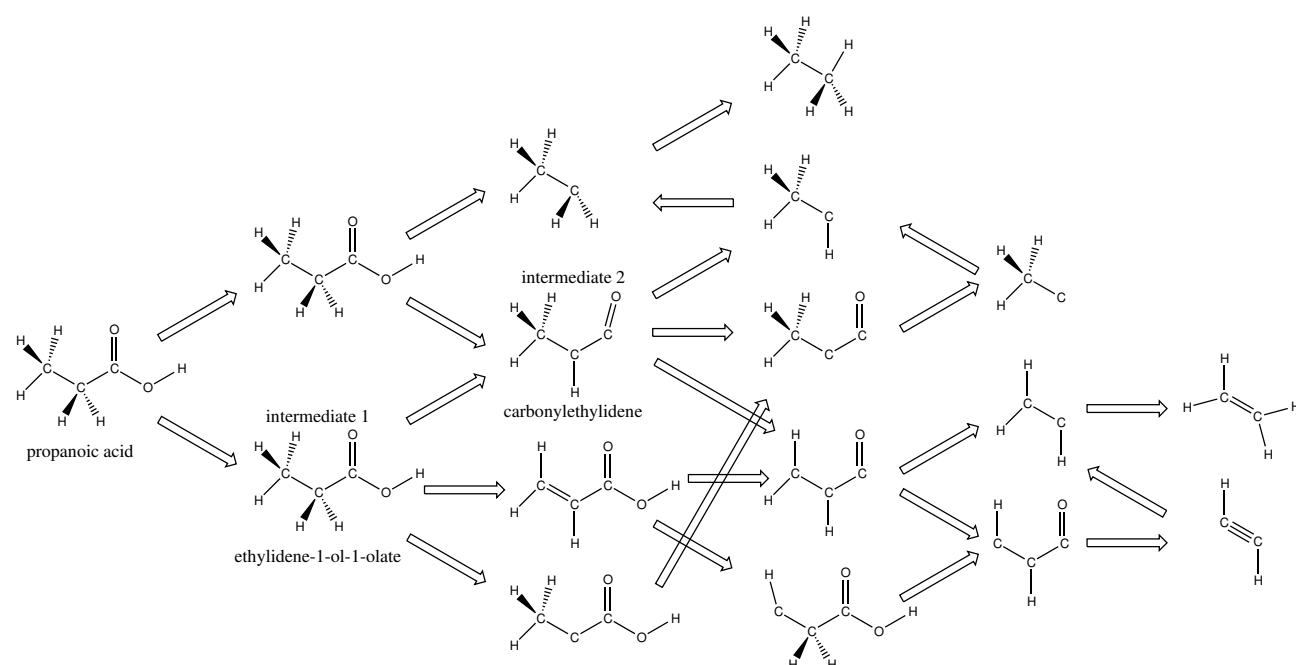


Figure S1: Propanoic acid dissociation reaction network derived from reference [1].

ID	Reaction	S-ZStruct		Original Study	
		E_a	ΔE	E_a	ΔE
P1	$\text{CH}_3\text{CHCOOH}^* \longrightarrow \text{CH}_3^* + \text{CHCOOH}^*$	31.7	16.2	-	-
P2	$\text{CH}_3\text{CHCOOH}^* \longrightarrow \text{CH}_2\text{CHCOOH}^* + \text{H}^*$	25.3	-6.4	-	-
P3	$\text{CH}_3\text{CHCOOH}^* \longrightarrow \text{CH}_3\text{CHCO}^* + \text{OH}^*$	33.6	16.1	-	-
P4	$\text{CH}_3\text{CHCOOH}^* \longrightarrow \text{CH}_3\text{CH}^* + \text{COOH}^*$	0.7	-5.5	-	-
P5	$\text{CH}_3\text{CHCOOH}^* \longrightarrow \text{CH}_3\text{CCOOH}^* + \text{H}^*$	31.7	12.6	-	-
P6	$\text{CH}_3\text{CHCO}^* \longrightarrow \text{CH}_3^* + \text{CHCO}^*$	35.7	22.9	-	-
P7	$\text{CH}_3\text{CHCO}^* \longrightarrow \text{CH}_2\text{CHCO}^* + \text{H}^*$	25.3	-4.9	-	-
P8	$\text{CH}_3\text{CHCO}^* \longrightarrow \text{CH}_3\text{CH}^* + \text{CO}^*$	21.7 (6.9%)	-13.2 (26.9%)	23.3	-18.2
P9	$\text{CH}_3\text{CHCO}^* \longrightarrow \text{CH}_3\text{CCO}^* + \text{H}^*$	17.8	-9.4	-	-

Table S1: Activation energies and heat of reactions for the portion of the propanoic acid dissociation network calculated by S-ZStruct. For reactions P6 to P9 the energies for the initial structure at 0° are reported. Only reaction P8 is run with the same parameters in the original study¹. All energies are in kcal/mol.

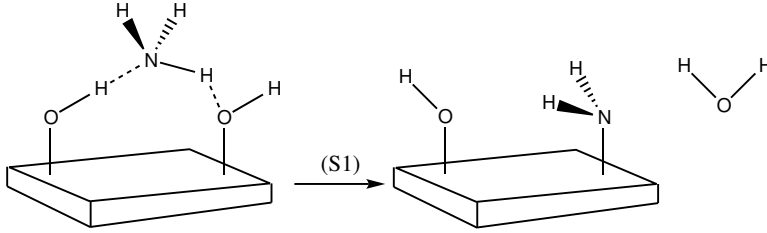


Figure S2: Adsorption of an ammonia molecule on OH-terminated Si(100) surface. $E_a = 3.9$ kcal/mol, $E_{rxn} = -8.1$ kcal/mol.

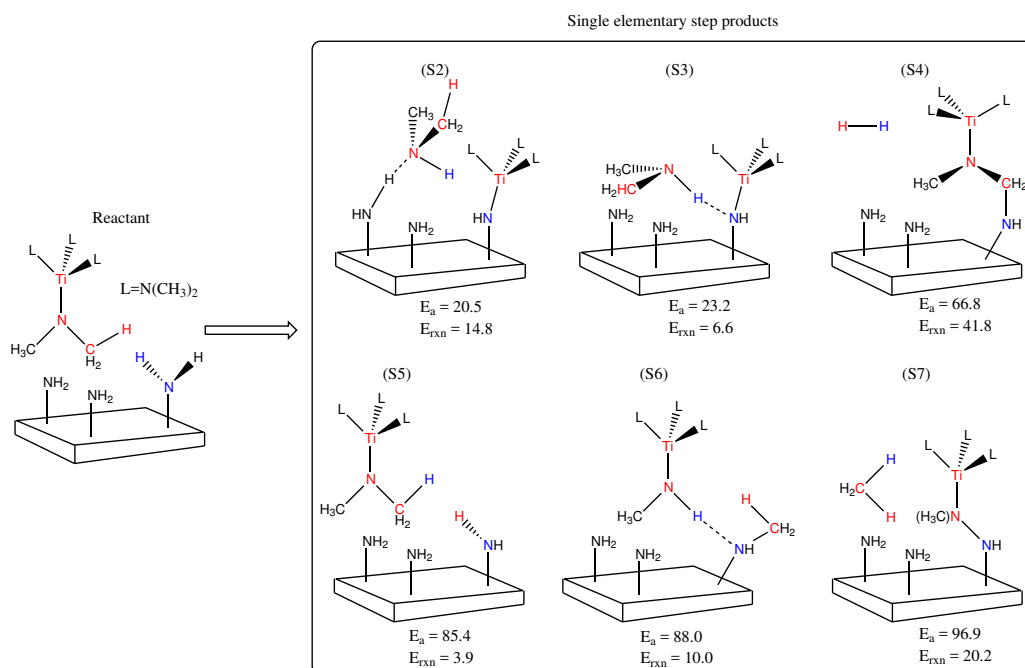


Figure S3: Reaction paths for the reaction between TDMAT and adsorbed amido ligands. Reactive atoms are marked in red and blue.

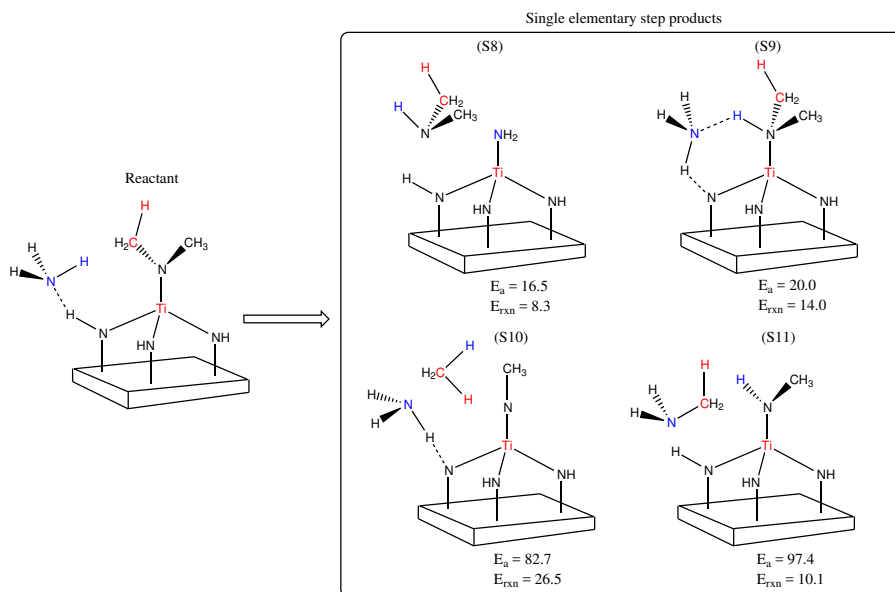


Figure S4: Reaction paths for the second ammonia cycle. NH_3 is stabilized over the surface through formation of H-bonds. Reaction S8 is the lowest barrier pathway. Reactive atoms are marked in red and blue.

Step (1)			Step (2)			Step (3)			Step (4)			Step (5)			Ti Reduction		
ID	E_a	ΔE	ID	E_a	ΔE	ID	E_a	ΔE	ID	E_a	ΔE	ID	E_a	ΔE	ID	E_a	ΔE
S1	21.2	15.4	S2	20.5	14.8	1	29.9	21.9	7	35.4	29.9	S8	16.5	8.3	13	94.3	80.3
			S3	23.2	6.6	2	35.1	18.6	8	65.1	38.2	S9	20.0	14.0	14	87.7	84.5
			S4	66.8	41.8	3	65.5	24.9	9	69.7	-0.7	S10	82.7	26.5	15	40.3	26.2
			S5	85.4	3.9	4	89.0	6.0	10	77.0	14.9	S11	97.4	10.1	16	36.5	32.7
			S6	88.0	10.0	5	90.6	2.8	11	81.6	12.6				17	25.9	11.5
			S7	96.9	20.2	6	96.3	48.8	12	93.4	75.9						

Table S2: Activation energies and heat of reactions for ALD of TiN network. All energies are in kcal/mol.

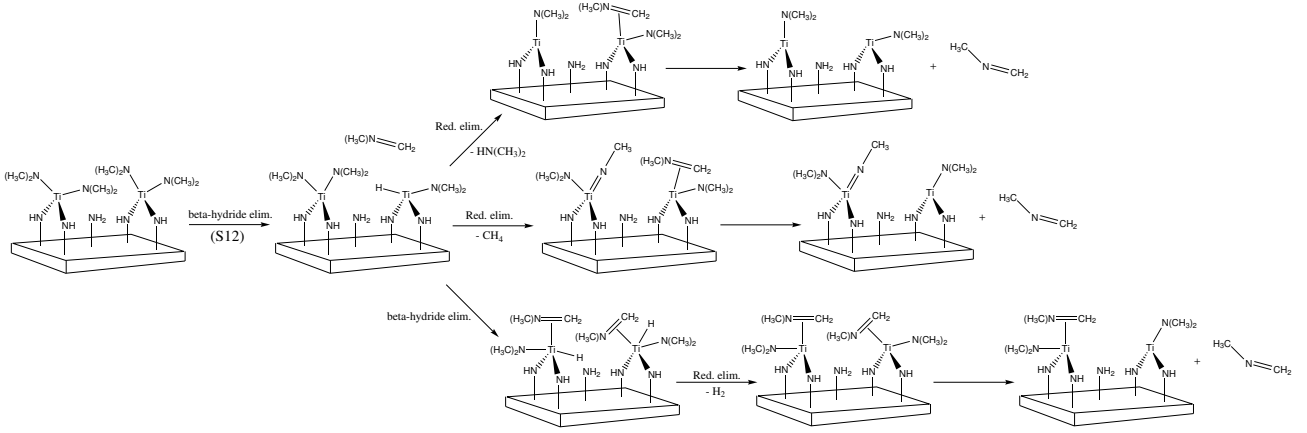


Figure S5: Reaction paths for β -hydride elimination and Ti reduction.

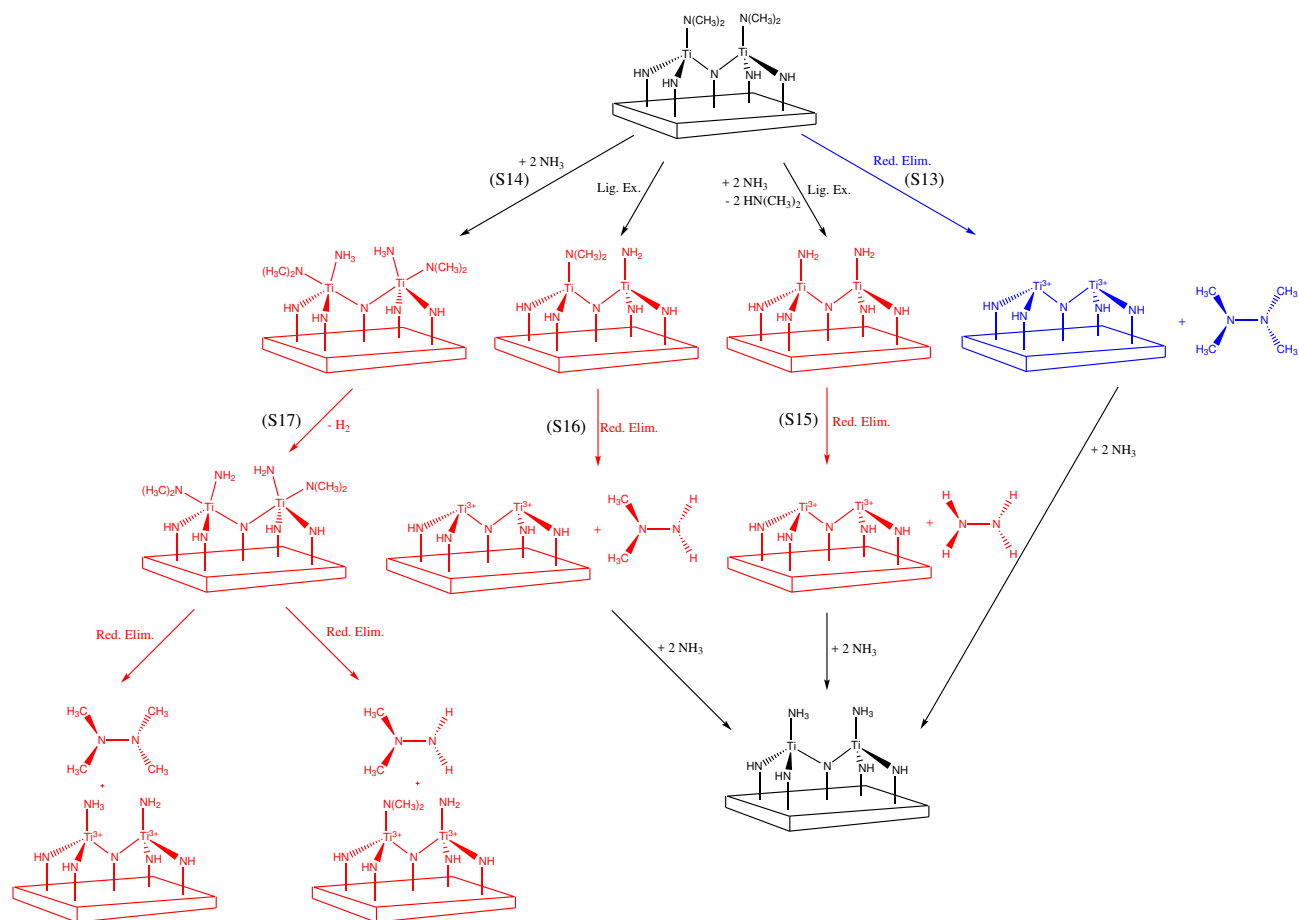
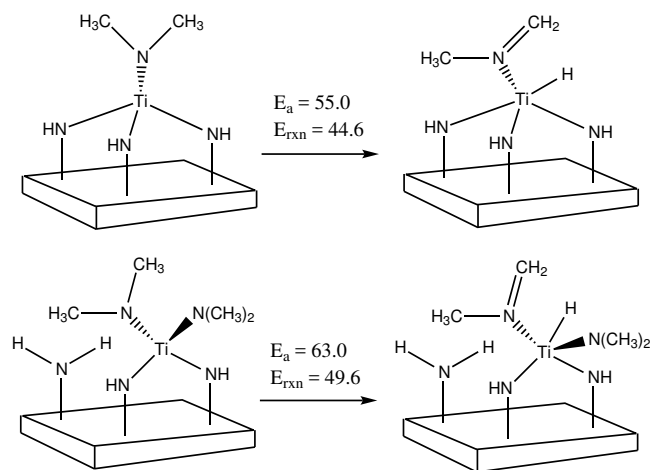


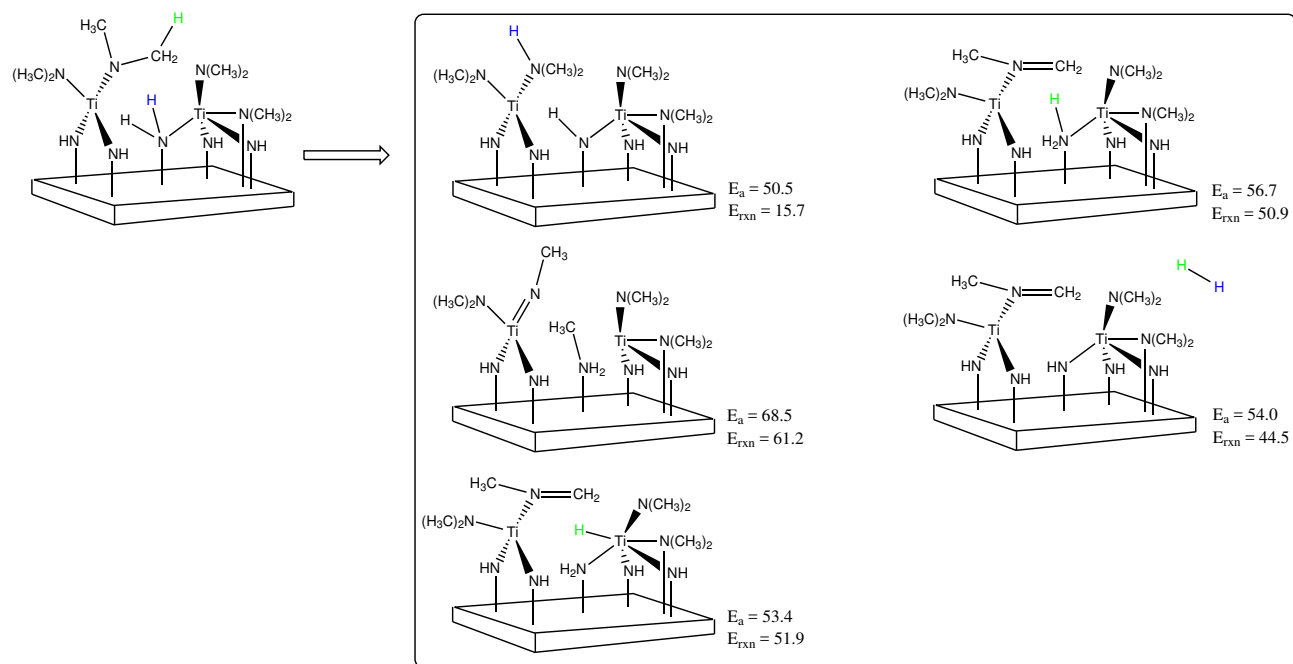
Figure S6: Summary of the proposed reaction paths by the literature for reduction of Ti(IV) to Ti(III). Blue: reductive elimination of tetramethylhydrazine after the third ligand-exchange reaction. Red: reductive elimination of hydrazine or 1,1-dimethylhydrazine after the third ligand-exchange and ammonia cycle. β -hydride elimination followed by formation of N-methylmethanimine, H_2 , methane, or dimethylamine reductive elimination. Reaction paths following a high barrier are considered infeasible and not simulated.

ID	E_a	ΔE
S12	58.6	37.8
S13	74.4	71.8
S14	7.8	-0.1
S15	87.7	84.5
S16	76.6	76.0
S17	91.5	74.6

Table S3: Activation energies and heat of reactions Ti reduction. All energies are in kcal/mol.



(a)



(b)

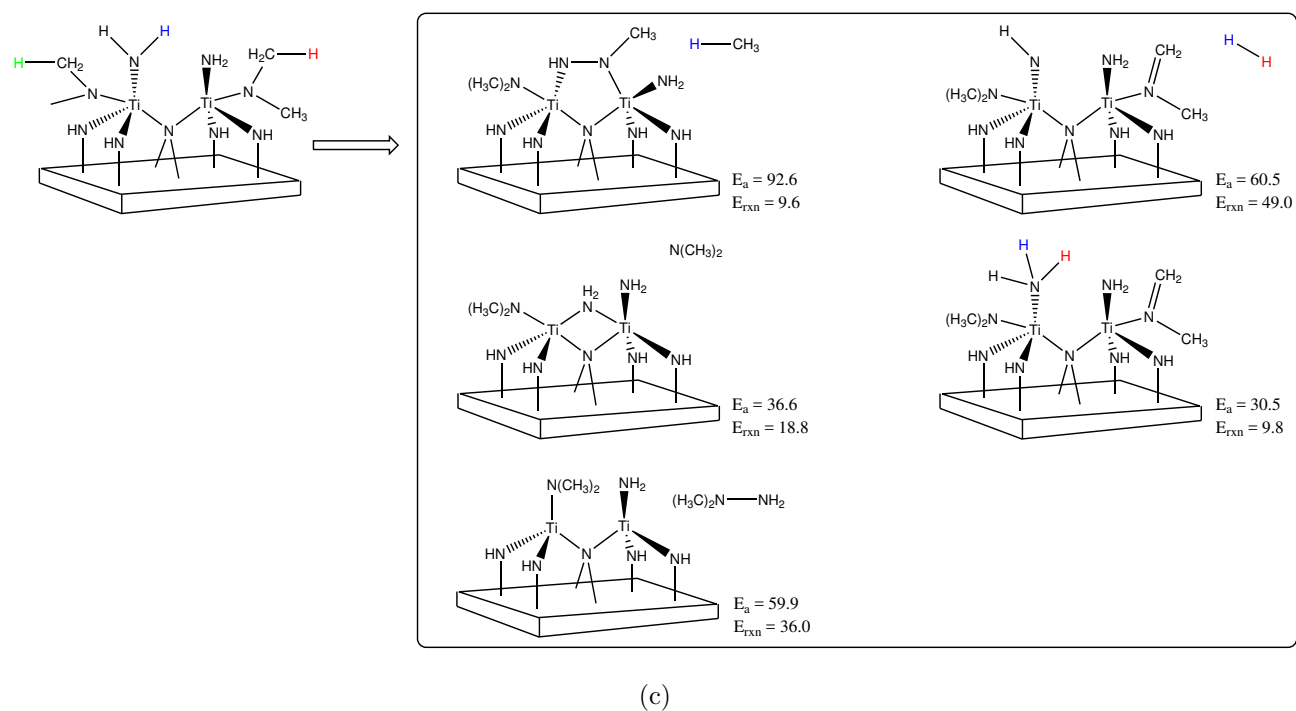


Figure S7: Some reaction pathways calculated by S-ZStruct that have high activation energies but demonstrate capabilities of S-ZStruct to examine different possibilities.

2 Cartesian coordinates of the reactants, TSs, and products

reaction-P1-reactant	36	16.179666
36	31.688091	Pd 0.000000 1.588090 10.000000
0.000	Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 2.750650 1.588090 10.000000
Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 5.501290 1.588090 10.000000
Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 8.251940 1.588090 10.000000
Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000
Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000
Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000
Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000
Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000
Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000
Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000
Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000
Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd -0.153106 0.139263 12.254090
Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd -0.187159 0.151666 12.245767	Pd 2.564249 0.156066 12.227976
Pd -0.209462 0.163908 12.254964	Pd 2.549479 0.173249 12.222711	Pd 5.331726 0.112623 12.231201
Pd 2.536125 0.173498 12.217059	Pd 5.311254 0.127411 12.185003	Pd 8.139554 0.113845 12.216710
Pd 5.295450 0.173813 12.186196	Pd 8.089989 0.134667 12.213331	Pd 1.210204 2.514477 12.274773
Pd 8.064470 0.155505 12.226789	Pd 1.174649 2.542685 12.273539	Pd 3.894452 2.538893 12.289166
Pd 1.162860 2.540498 12.264457	Pd 3.877448 2.540478 12.286936	Pd 6.669499 2.465903 12.625674
Pd 3.895623 2.553666 12.295006	Pd 6.649431 2.495099 12.533138	Pd 9.522098 2.484515 12.269012
Pd 6.666300 2.504970 12.499846	Pd 9.500526 2.497448 12.250394	Pd 2.628084 4.898256 12.244661
Pd 9.437868 2.535343 12.267627	Pd 2.580645 4.904329 12.254457	Pd 5.341377 4.903622 12.232476
Pd 2.562487 4.921603 12.249956	Pd 5.286419 4.939697 12.241858	Pd 8.159694 4.917310 12.344396
Pd 5.291112 4.917170 12.236284	Pd 8.109266 4.929625 12.376914	Pd 10.921053 4.876700 12.253023
Pd 8.060919 4.925674 12.298784	Pd 10.860298 4.904014 12.275306	C 6.030476 1.326417 14.298037
Pd 10.817928 4.917387 12.241345	C 6.470673 2.082667 14.728272	C 7.771747 3.653527 13.851901
C 6.286237 1.606622 15.357567	C 7.578530 3.604552 13.983377	H 6.059228 0.208163 14.280650
C 7.084273 2.607715 14.551020	H 6.782613 1.032723 14.583940	H 6.777572 1.642123 15.047592
H 6.594824 0.575869 15.106113	H 6.910938 2.436722 15.675675	H 5.030142 1.686808 14.585865
H 6.485362 1.761335 16.442471	H 5.379208 2.213506 14.759189	C 7.257542 4.518897 14.963044
H 5.196505 1.698110 15.206926	C 7.178065 4.753213 14.855160	H 8.642059 3.088832 14.270525
C 6.907608 4.045204 14.871848	H 8.544611 3.209687 14.349667	O 8.006650 5.175596 15.679934
H 8.173062 2.401821 14.561897	O 7.976574 5.444837 15.483461	O 5.888079 4.513248 15.129124
O 7.776261 4.929171 14.691578	O 5.807415 4.956918 14.930775	H 5.704340 5.146935 15.855787
O 5.700174 4.350405 15.445685	H 5.683363 5.770279 15.463689	X 3.925406 0.937987 13.741345
H 5.703684 5.317322 15.606667	X 3.925406 0.937987 13.741345	X 9.439424 4.121507 13.741345
X 3.925406 0.937987 13.741345	X 9.439424 4.121507 13.741345	*****
X 9.439424 4.121507 13.741345	reaction-P1-product	reaction-P2-reactant
reaction-P1-TS	36	36

0.000000	Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000
Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000
Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000
Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000
Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000
Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd -0.219608 0.167405 12.306328
Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd 2.501265 0.185403 12.255784
Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 5.232692 0.168453 12.262331
Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 8.026155 0.100749 12.317541
Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd -0.215390 0.140971 12.252841	Pd 1.205868 2.553547 12.255654
Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd 2.510582 0.198660 12.244600	Pd 3.898276 2.551335 12.281075
Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 5.290169 0.145530 12.209382	Pd 6.669153 2.552899 12.552866
Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 8.032913 0.171442 12.248243	Pd 9.498789 2.618340 12.392760
Pd -0.175408 0.155965 12.242022	Pd 1.191837 2.557452 12.306284	Pd 2.570747 4.913444 12.235192
Pd 2.571846 0.167460 12.219845	Pd 3.942087 2.510329 12.278276	Pd 5.296656 4.958915 12.240753
Pd 5.332791 0.142371 12.209621	Pd 6.707960 2.633122 12.643566	Pd 8.048728 4.956088 12.203663
Pd 8.082033 0.171436 12.238308	Pd 9.494906 2.486383 12.357641	Pd 10.792701 4.943225 12.170363
Pd 1.187527 2.551618 12.266428	Pd 2.591260 4.905673 12.236806	C 6.577131 1.591864 14.514207
Pd 3.929563 2.504833 12.282650	Pd 5.311081 4.941867 12.236013	C 6.587820 3.004383 14.660661
Pd 6.687988 2.526584 12.520303	Pd 8.105691 4.944361 12.217703	H 9.242944 1.085462 13.069412
Pd 9.460460 2.514343 12.302009	Pd 10.853157 4.907681 12.216811	H 7.499409 1.021325 14.690692
Pd 2.605115 4.913273 12.241888	C 7.397709 2.043157 14.760474	H 5.637684 1.047336 14.684339
Pd 5.369374 4.925080 12.290757	C 6.669160 3.296003 14.676538	C 5.385560 3.784841 15.083563
Pd 8.119107 4.895804 12.211346	H 8.396392 2.143313 13.731055	H 7.520568 3.548062 14.862792
Pd 10.859210 4.912486 12.230684	H 8.297813 2.024912 15.404116	O 5.353372 5.008825 15.197284
C 6.825543 1.442611 15.347755	H 6.819977 1.111624 14.834428	O 4.313786 2.980671 15.409097
C 6.780869 2.761861 14.608893	C 5.265108 3.477646 15.130328	H 3.575404 3.589195 15.622988
H 7.713439 0.854486 15.048760	H 7.245091 4.224902 14.805777	X 4.008952 0.957487 13.730684
H 6.900933 1.629337 16.442624	O 4.728991 4.576529 15.259891	X 8.804132 3.725986 13.730684
H 5.922770 0.832511 15.174529	O 4.632678 2.290278 15.436967	*****
C 5.600156 3.634544 14.838544	H 3.710972 2.526173 15.673070	reaction-P3-reactant
H 7.695647 3.370164 14.726761	X 4.008952 0.957487 13.730684	36
O 5.585277 4.878641 14.711726	X 8.804132 3.725986 13.730684	0.000000
O 4.475707 2.956573 15.247981	reaction-P2-product	Pd 0.000000 1.588090 10.000000
H 3.766083 3.630330 15.317210	36	Pd 2.750650 1.588090 10.000000
X 4.008952 0.957487 13.730684	-6.395682	Pd 5.501290 1.588090 10.000000
X 8.804132 3.725986 13.730684	Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 8.251940 1.588090 10.000000
reaction-P2-TS	Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000
36	Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000
25.324220	Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000
Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000
Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000
Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000

Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 5.422173 0.097501 12.239836	Pd 6.842861 2.453151 12.465175
Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 8.180020 0.103712 12.274864	Pd 9.517478 2.512719 12.323748
Pd -0.175408 0.155965 12.242022	Pd 1.286741 2.503832 12.279131	Pd 2.677959 4.872100 12.369647
Pd 2.571846 0.167460 12.219845	Pd 4.096542 2.509879 12.604634	Pd 5.452258 4.920221 12.247738
Pd 5.332791 0.142371 12.209621	Pd 6.845865 2.450068 12.407314	Pd 8.214136 4.858868 12.174542
Pd 8.082033 0.171436 12.238308	Pd 9.531047 2.505777 12.304023	Pd 10.956452 4.866618 12.234702
Pd 1.187527 2.551618 12.266428	Pd 2.616854 4.891758 12.200513	C 5.532221 0.901826 14.943295
Pd 3.929563 2.504833 12.282650	Pd 5.409948 4.976912 12.244082	C 5.627894 2.073300 14.010001
Pd 6.687988 2.526584 12.520303	Pd 8.197239 4.856249 12.185091	H 6.515127 0.758235 15.443025
Pd 9.460460 2.514343 12.302009	Pd 10.925597 4.873659 12.224058	H 4.780665 1.117814 15.733791
Pd 2.605115 4.913273 12.241888	C 5.532454 0.941620 14.956432	H 5.248102 -0.074787 14.482370
Pd 5.369374 4.925080 12.290757	C 5.673488 2.167936 14.084366	C 3.534916 4.097967 14.095349
Pd 8.119107 4.895804 12.211346	H 6.541445 0.581836 15.244328	H 5.810725 3.013395 14.573246
Pd 10.859210 4.912486 12.230684	H 4.973028 1.191397 15.885019	O 4.450935 4.825333 14.552049
C 6.825543 1.442611 15.347755	H 4.984826 0.091393 14.486342	O 2.589544 3.560311 14.963843
C 6.780869 2.761861 14.608893	C 4.271582 3.544077 14.351538	H 2.716287 4.017477 15.828290
H 7.713439 0.854486 15.048760	H 6.268626 2.951193 14.597003	X 9.489158 2.539487 13.730684
H 6.900933 1.629337 16.442624	O 4.773250 4.705132 14.345612	X 2.638900 3.330486 13.730684
H 5.922770 0.832511 15.174529	O 3.438433 3.173737 15.376752	*****
C 5.600156 3.634544 14.838544	H 3.348652 3.959690 15.960170	reaction-P4-reactant
H 7.695647 3.370164 14.726761	X 9.489158 2.539487 13.730684	36
O 5.585277 4.878641 14.711726	X 2.638900 3.330486 13.730684	0.000000
O 4.475707 2.956573 15.247981	reaction-P3-product	Pd 0.000000 1.588090 10.000000
H 3.766083 3.630330 15.317210	36	Pd 2.750650 1.588090 10.000000
X 9.489158 2.539487 13.730684	16.135589	Pd 5.501290 1.588090 10.000000
X 2.638900 3.330486 13.730684	Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 8.251940 1.588090 10.000000
reaction-P3-TS	Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000
36	Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000
33.620605	Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000
Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000
Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000
Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000
Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000
Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000
Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd -0.177597 0.155877 12.243056
Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 2.567678 0.168257 12.219392
Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 5.327672 0.143749 12.209770
Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd -0.120838 0.165318 12.195564	Pd 8.078447 0.173458 12.236617
Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd 2.645748 0.134136 12.194586	Pd 1.183078 2.552113 12.263593
Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 5.388602 0.141006 12.248203	Pd 3.927253 2.505449 12.281460
Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 8.169735 0.091621 12.239603	Pd 6.681473 2.528067 12.528052
Pd -0.112648 0.185396 12.261654	Pd 1.272524 2.484722 12.295237	Pd 9.455688 2.515782 12.299169
Pd 2.645812 0.138675 12.213662	Pd 4.090118 2.525095 12.669192	Pd 2.598210 4.913487 12.244561

Pd 5.357308 4.922170 12.298613	C 7.188654 3.275938 14.427370	C 6.007993 4.147909 14.740446
Pd 8.111640 4.898403 12.213311	H 8.906585 1.996519 14.797714	H 9.784409 3.946248 13.071308
Pd 10.853572 4.913385 12.230157	H 8.136586 2.650840 16.279933	O 5.467552 5.257452 14.560433
C 6.991814 1.503841 15.361205	H 7.361818 1.309891 15.383458	O 5.528322 3.296762 15.700264
C 6.819410 2.805417 14.610913	C 5.908245 3.769235 14.994257	H 4.730632 3.730317 16.070237
H 7.927840 0.999440 15.059294	H 7.824723 4.192322 14.290025	X 4.008952 2.539487 13.730684
H 7.055677 1.707768 16.453958	O 5.196661 4.688615 14.523737	X 10.174184 3.725986 13.730684
H 6.148704 0.809006 15.202108	O 5.528207 3.167952 16.157556	*****
C 5.592138 3.597351 14.892970	H 4.681745 3.588975 16.420768	reaction-P5-reactant
H 7.691334 3.480813 14.689323	X 4.008952 2.539487 13.730684	34
O 5.472507 4.828775 14.712807	X 10.174184 3.725986 13.730684	0.000000
O 4.564686 2.863904 15.432371	reaction-P4-product	Pd 0.000000 1.588090 10.000000
H 3.808296 3.483259 15.520880	36	Pd 2.750650 1.588090 10.000000
X 4.008952 2.539487 13.730684	-5.098088	Pd 5.501290 1.588090 10.000000
X 10.174184 3.725986 13.730684	Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 8.251940 1.588090 10.000000
reaction-P4-TS	Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000
36	Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000
0.349011	Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000
Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000
Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000
Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000
Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000
Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000
Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd -0.175408 0.155965 12.242022
Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 2.571846 0.167460 12.219845
Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 5.332791 0.142371 12.209621
Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd -0.170399 0.151687 12.228770	Pd 8.082033 0.171436 12.238308
Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd 2.564825 0.150621 12.236726	Pd 1.187527 2.551618 12.266428
Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 5.302390 0.142718 12.179121	Pd 3.929563 2.504833 12.282650
Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 8.107724 0.127296 12.169659	Pd 6.687988 2.526584 12.520303
Pd -0.147727 0.145735 12.253129	Pd 1.145591 2.550302 12.282204	Pd 9.460460 2.514343 12.302009
Pd 2.596110 0.169617 12.216042	Pd 3.843343 2.519096 12.299996	Pd 2.605115 4.913273 12.241888
Pd 5.352268 0.138929 12.206682	Pd 6.595976 2.485863 12.462723	Pd 5.369374 4.925080 12.290757
Pd 8.107066 0.150627 12.240245	Pd 9.421339 2.466066 12.285792	Pd 8.119107 4.895804 12.211346
Pd 1.205488 2.542591 12.250950	Pd 2.590061 4.882571 12.275001	Pd 10.859210 4.912486 12.230684
Pd 3.950721 2.510614 12.256251	Pd 5.256405 4.934549 12.225525	C 6.825543 1.442611 15.347755
Pd 6.714288 2.519657 12.522914	Pd 8.026195 4.893499 12.612896	C 6.780869 2.761861 14.608893
Pd 9.495218 2.490699 12.257582	Pd 10.887866 4.984196 12.366887	H 7.713439 0.854486 15.048760
Pd 2.589272 4.904720 12.252447	C 8.191995 2.995570 15.023664	H 6.900933 1.629337 16.442624
Pd 5.331887 4.935726 12.299845	C 7.217647 3.606244 14.028866	H 5.922770 0.832511 15.174529
Pd 8.116692 4.909087 12.250268	H 9.007240 2.415639 14.541915	C 5.600156 3.634544 14.838544
Pd 10.857261 4.908659 12.245031	H 8.669316 3.797439 15.627711	H 7.695647 3.370164 14.726761
C 7.933336 2.246047 15.264800	H 7.652925 2.324167 15.722690	O 5.585277 4.878641 14.711726

O 4.475707 2.956573 15.247981	Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000
H 3.766083 3.630330 15.317210	Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000
reaction-P5-TS	Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000
34	Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 8.251936 6.352343 10.000000
31.652582	Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 11.002582 6.352343 10.000000
Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd -0.193565 0.153459 12.252505
Pd 2.750650 1.588090 10.000000	Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 2.534171 0.169345 12.223945
Pd 5.501290 1.588090 10.000000	Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd 5.304187 0.148770 12.161626
Pd 8.251940 1.588090 10.000000	Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd 8.075431 0.156636 12.223577
Pd 1.375320 3.970220 10.000000	Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 1.150811 2.543577 12.265400
Pd 4.125970 3.970220 10.000000	Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 3.877240 2.546418 12.288214
Pd 6.876610 3.970220 10.000000	Pd -0.250492 0.175332 12.297342	Pd 6.634536 2.510550 12.465085
Pd 9.627260 3.970220 10.000000	Pd 2.485931 0.080492 12.321341	Pd 9.444015 2.532232 12.249868
Pd 2.750650 6.352340 10.000000	Pd 5.370660 0.119763 12.173795	Pd 2.560490 4.922067 12.255192
Pd 5.501290 6.352340 10.000000	Pd 8.069833 0.165481 12.283171	Pd 5.292997 4.913114 12.244953
Pd 8.251940 6.352340 10.000000	Pd 1.145185 2.572757 12.217134	Pd 8.073279 4.931236 12.455411
Pd 11.002580 6.352340 10.000000	Pd 3.937214 2.621133 12.412048	Pd 10.834388 4.903842 12.279380
Pd -0.159725 0.147762 12.257967	Pd 6.710988 2.543381 12.565825	C 6.007466 2.818702 15.384249
Pd 2.579854 0.162405 12.236472	Pd 9.480660 2.519586 12.268567	C 7.125616 3.097360 14.388312
Pd 5.358812 0.144210 12.185389	Pd 2.539998 4.954834 12.253132	H 5.708289 1.756698 15.353273
Pd 8.120632 0.140386 12.241685	Pd 5.284454 4.918111 12.194320	H 6.368037 3.053884 16.409307
Pd 1.237402 2.530920 12.282902	Pd 8.118370 4.894321 12.241268	H 5.112215 3.436341 15.187844
Pd 3.997766 2.542644 12.407864	Pd 10.822233 4.917956 12.260844	C 7.589769 4.506287 14.338550
Pd 6.788994 2.521665 12.572001	C 6.529288 1.057383 15.471560	H 8.030558 2.467613 14.553760
Pd 9.531726 2.510988 12.328687	C 7.272513 2.018485 14.573199	O 7.686192 5.356296 15.190550
Pd 2.620461 4.905522 12.229878	H 6.930203 0.035359 15.362612	X 3.931617 0.918525 13.779380
Pd 5.374799 4.918132 12.191009	H 6.677198 1.377485 16.527509	X 9.453833 4.106779 13.779380
Pd 8.144892 4.905088 12.206979	H 5.444332 1.036543 15.267657	reaction-P6-TS
Pd 10.879335 4.892905 12.233454	C 6.761211 3.351714 14.419474	34
C 6.606675 0.782994 15.260332	H 8.374541 1.965468 14.595811	35.733073
C 7.027480 2.091216 14.630125	O 6.321573 4.313923 14.981575	Pd 0.000000 1.588086 10.000000
H 7.338552 -0.008987 15.019319	O 3.312076 1.241704 13.813025	Pd 2.750645 1.588086 10.000000
H 6.574721 0.903081 16.365417	H 2.536202 1.672278 14.236941	Pd 5.501291 1.588086 10.000000
H 5.600612 0.478772 14.928373	*****	Pd 8.251936 1.588086 10.000000
C 6.215897 3.248349 14.601517	reaction-P6-reactant	Pd 1.375323 3.970215 10.000000
H 8.065829 2.408390 14.861621	0.000000	Pd 4.125968 3.970215 10.000000
O 5.871282 4.313519 14.986011	Pd 0.000000 1.588086 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000
O 3.980335 2.064926 14.365596	Pd 2.750645 1.588086 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000
H 3.365700 2.737044 14.724184	Pd 5.501291 1.588086 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000
reaction-P5-product	Pd 8.251936 1.588086 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000
34	Pd 1.375323 3.970215 10.000000	Pd 8.251936 6.352343 10.000000
12.618368	Pd 4.125968 3.970215 10.000000	Pd 11.002582 6.352343 10.000000
Pd 0.000000 1.588090 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000	Pd -0.178608 0.140400 12.249631

Pd 2.534798 0.186110 12.236281	Pd 9.520735 2.469075 12.293516	C 6.007466 2.818702 15.384249
Pd 5.310608 0.149920 12.212676	Pd 2.637227 4.889989 12.244799	C 7.125616 3.097360 14.388312
Pd 8.097726 0.114568 12.220237	Pd 5.365983 4.878766 12.224880	H 5.708289 1.756698 15.353273
Pd 1.177930 2.534040 12.287957	Pd 8.180164 4.954519 12.325843	H 6.368037 3.053884 16.409307
Pd 3.872828 2.554436 12.285594	Pd 10.947572 4.859256 12.257093	H 5.112215 3.436341 15.187844
Pd 6.648244 2.453060 12.526837	C 5.971690 1.449230 14.402765	C 7.589769 4.506287 14.338550
Pd 9.501772 2.489271 12.254228	C 8.031821 3.410212 13.720853	H 8.030558 2.467613 14.553760
Pd 2.602160 4.904943 12.252601	H 6.010859 0.338313 14.420652	O 7.686192 5.356296 15.190550
Pd 5.321783 4.921896 12.227354	H 6.670715 1.830177 15.165737	X 8.073279 4.903842 13.779380
Pd 8.154536 4.981453 12.373134	H 4.946111 1.803349 14.602304	X 2.551062 1.715589 13.779380
Pd 10.901637 4.893156 12.280949	C 7.581580 4.633313 14.283121	reaction-P7-TS
C 6.331317 2.249028 14.750901	H 8.792665 2.878460 14.345389	34
C 7.802479 3.411800 13.852539	O 7.211475 5.298682 15.198888	25.346950
H 6.269077 1.151041 14.664203	X 3.931617 0.918525 13.779380	Pd 0.000000 1.588086 10.000000
H 6.934465 2.513415 15.634732	X 9.453833 4.106779 13.779380	Pd 2.750645 1.588086 10.000000
H 5.348190 2.741437 14.795229	*****	Pd 5.501291 1.588086 10.000000
C 7.614421 4.767020 14.297631	reaction-P7-reactant	Pd 8.251936 1.588086 10.000000
H 8.690574 2.931364 14.321745	34	Pd 1.375323 3.970215 10.000000
O 7.386651 5.484330 15.225387	0.000000	Pd 4.125968 3.970215 10.000000
X 3.931617 0.918525 13.779380	Pd 0.000000 1.588086 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000
X 9.453833 4.106779 13.779380	Pd 2.750645 1.588086 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000
reaction-P6-product	Pd 5.501291 1.588086 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000
34	Pd 8.251936 1.588086 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000
22.861599	Pd 1.375323 3.970215 10.000000	Pd 8.251936 6.352343 10.000000
Pd 0.000000 1.588086 10.000000	Pd 4.125968 3.970215 10.000000	Pd 11.002582 6.352343 10.000000
Pd 2.750645 1.588086 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000	Pd -0.148998 0.170894 12.258833
Pd 5.501291 1.588086 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000	Pd 2.586450 0.159800 12.238426
Pd 8.251936 1.588086 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000	Pd 5.361865 0.105708 12.181040
Pd 1.375323 3.970215 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000	Pd 8.131650 0.111801 12.249199
Pd 4.125968 3.970215 10.000000	Pd 8.251936 6.352343 10.000000	Pd 1.245895 2.543401 12.314543
Pd 6.876613 3.970215 10.000000	Pd 11.002582 6.352343 10.000000	Pd 4.083553 2.538577 12.527197
Pd 9.627259 3.970215 10.000000	Pd -0.193565 0.153459 12.252505	Pd 6.808339 2.440991 12.325731
Pd 2.750645 6.352343 10.000000	Pd 2.534171 0.169345 12.223945	Pd 9.527788 2.523189 12.252530
Pd 5.501291 6.352343 10.000000	Pd 5.304187 0.148770 12.161626	Pd 2.579776 4.909019 12.224745
Pd 8.251936 6.352343 10.000000	Pd 8.075431 0.156636 12.223577	Pd 5.313887 4.957069 12.186071
Pd 11.002582 6.352343 10.000000	Pd 1.150811 2.543577 12.265400	Pd 8.062044 4.891676 12.506528
Pd -0.153625 0.123427 12.250334	Pd 3.877240 2.546418 12.288214	Pd 10.867892 4.871020 12.283798
Pd 2.553067 0.158221 12.230043	Pd 6.634536 2.510550 12.465085	C 5.101390 3.071949 14.477521
Pd 5.321339 0.117723 12.245660	Pd 9.444015 2.532232 12.249868	C 6.577790 3.046245 14.267750
Pd 8.127307 0.083631 12.220356	Pd 2.560490 4.922067 12.255192	H 4.406854 1.799528 13.902639
Pd 1.210741 2.499488 12.298391	Pd 5.292997 4.913114 12.244953	H 4.799932 2.545346 15.407905
Pd 3.887050 2.542190 12.287176	Pd 8.073279 4.931236 12.455411	H 4.641394 4.079350 14.482202
Pd 6.662025 2.379036 12.638072	Pd 10.834388 4.903842 12.279380	C 7.350256 4.333885 14.279925

H 7.116792 2.274858 14.852702	34	Pd 1.375323 3.970215 10.000000
O 7.667371 5.024048 15.223691	0.000000	Pd 4.125968 3.970215 10.000000
X 8.073279 4.903842 13.779380	Pd 0.000000 1.588086 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000
X 2.551062 1.715589 13.779380	Pd 2.750645 1.588086 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000
reaction-P7-product	Pd 5.501291 1.588086 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000
34	Pd 8.251936 1.588086 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000
-4.885637	Pd 1.375323 3.970215 10.000000	Pd 8.251936 6.352343 10.000000
Pd 0.000000 1.588086 10.000000	Pd 4.125968 3.970215 10.000000	Pd 11.002582 6.352343 10.000000
Pd 2.750645 1.588086 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000	Pd -0.143223 0.146508 12.242389
Pd 5.501291 1.588086 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000	Pd 2.581808 0.128085 12.247190
Pd 8.251936 1.588086 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000	Pd 5.331071 0.137297 12.177240
Pd 1.375323 3.970215 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000	Pd 8.137694 0.108009 12.188479
Pd 4.125968 3.970215 10.000000	Pd 8.251936 6.352343 10.000000	Pd 1.209835 2.488515 12.310663
Pd 6.876613 3.970215 10.000000	Pd 11.002582 6.352343 10.000000	Pd 3.889274 2.538152 12.308752
Pd 9.627259 3.970215 10.000000	Pd -0.193565 0.153459 12.252505	Pd 6.633516 2.432516 12.437510
Pd 2.750645 6.352343 10.000000	Pd 2.534171 0.169345 12.223945	Pd 9.469988 2.511470 12.438823
Pd 5.501291 6.352343 10.000000	Pd 5.304187 0.148770 12.161626	Pd 2.625300 4.884909 12.244224
Pd 8.251936 6.352343 10.000000	Pd 8.075431 0.156636 12.223577	Pd 5.359756 4.876287 12.214809
Pd 11.002582 6.352343 10.000000	Pd 1.150811 2.543577 12.265400	Pd 8.154444 4.929233 12.441730
Pd -0.191072 0.185167 12.278853	Pd 3.877240 2.546418 12.288214	Pd 10.921509 4.893444 12.255954
Pd 2.564325 0.129411 12.272615	Pd 6.634536 2.510550 12.465085	C 6.440083 3.669139 15.213456
Pd 5.367671 0.105446 12.200795	Pd 9.444015 2.532232 12.249868	C 7.226578 2.831993 14.249496
Pd 8.115062 0.119541 12.270468	Pd 2.560490 4.922067 12.255192	H 5.563272 3.072173 15.547906
Pd 1.228775 2.550376 12.290156	Pd 5.292997 4.913114 12.244953	H 7.050465 3.910052 16.107539
Pd 4.044091 2.585949 12.510771	Pd 8.073279 4.931236 12.455411	H 6.055544 4.606629 14.773626
Pd 6.809164 2.440777 12.333449	Pd 10.834388 4.903842 12.279380	C 8.943805 3.800595 13.915837
Pd 9.526319 2.519239 12.265252	C 6.007466 2.818702 15.384249	H 7.730724 1.955621 14.697241
Pd 2.554569 4.930785 12.226496	C 7.125616 3.097360 14.388312	O 9.467324 4.097447 14.956135
Pd 5.295228 4.978855 12.219277	H 5.708289 1.756698 15.353273	X 4.621894 1.317057 13.779380
Pd 8.112429 4.893046 12.457140	H 6.368037 3.053884 16.409307	X 10.144110 3.708247 13.779380
Pd 10.867983 4.883933 12.260934	H 5.112215 3.436341 15.187844	reaction-P8-product
C 5.208199 3.655669 14.127933	C 7.589769 4.506287 14.338550	34
C 6.604949 3.218773 14.235516	H 8.030558 2.467613 14.553760	-3.417138
H 3.892370 0.957475 13.065046	O 7.686192 5.356296 15.190550	Pd 0.000000 1.588086 10.000000
H 4.486116 3.053025 14.718270	X 4.621894 1.317057 13.779380	Pd 2.750645 1.588086 10.000000
H 5.017874 4.745796 14.308974	X 10.144110 3.708247 13.779380	Pd 5.501291 1.588086 10.000000
C 7.673447 4.261163 14.280542	reaction-P8-TS	Pd 8.251936 1.588086 10.000000
H 6.826866 2.350717 14.885956	34	Pd 1.375323 3.970215 10.000000
O 8.311732 4.671124 15.221343	19.814245	Pd 4.125968 3.970215 10.000000
X 8.073279 4.903842 13.779380	Pd 0.000000 1.588086 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000
X 2.551062 1.715589 13.779380	Pd 2.750645 1.588086 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000
*****	Pd 5.501291 1.588086 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000
reaction-P8-reactant	Pd 8.251936 1.588086 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000

Pd 8.251936 6.352343 10.000000	Pd 8.075431 0.156636 12.223577	Pd 5.413956 4.871226 12.377061
Pd 11.002582 6.352343 10.000000	Pd 1.150811 2.543577 12.265400	Pd 8.206432 4.906849 12.369900
Pd -0.142276 0.135730 12.234604	Pd 3.877240 2.546418 12.288214	Pd 10.914657 4.868865 12.250245
Pd 2.576019 0.122309 12.241434	Pd 6.634536 2.510550 12.465085	C 5.430223 3.338812 15.116021
Pd 5.303591 0.148961 12.167616	Pd 9.444015 2.532232 12.249868	C 6.303259 3.724041 13.941263
Pd 8.138250 0.108491 12.161351	Pd 2.560490 4.922067 12.255192	H 4.780773 2.475781 14.884995
Pd 1.213386 2.502115 12.278862	Pd 5.292997 4.913114 12.244953	H 6.058821 3.076614 15.993438
Pd 3.865689 2.538273 12.324271	Pd 8.073279 4.931236 12.455411	H 4.798121 4.201070 15.403564
Pd 6.596541 2.449509 12.450116	Pd 10.834388 4.903842 12.279380	C 7.216534 4.856276 14.113905
Pd 9.443930 2.462921 12.449455	C 6.007466 2.818702 15.384249	H 7.534145 2.701415 13.745834
Pd 2.642056 4.878256 12.278788	C 7.125616 3.097360 14.388312	O 7.474665 5.595842 15.041786
Pd 5.347428 4.881398 12.234087	H 5.708289 1.756698 15.353273	X 4.621894 1.317057 13.779380
Pd 8.118908 4.889523 12.409536	H 6.368037 3.053884 16.409307	X 10.144110 3.708247 13.779380
Pd 10.906225 4.941323 12.378778	H 5.112215 3.436341 15.187844	reaction-P9-product
C 6.255585 3.627533 15.239774	C 7.589769 4.506287 14.338550	34
C 6.942359 2.747786 14.266032	H 8.030558 2.467613 14.553760	-9.434065
H 5.428924 3.027555 15.690873	O 7.686192 5.356296 15.190550	Pd 0.000000 1.588086 10.000000
H 6.943069 3.906790 16.065579	X 4.621894 1.317057 13.779380	Pd 2.750645 1.588086 10.000000
H 5.792238 4.529410 14.799140	X 10.144110 3.708247 13.779380	Pd 5.501291 1.588086 10.000000
C 9.623678 4.083797 13.646250	reaction-P9-TS	Pd 8.251936 1.588086 10.000000
H 7.698944 2.064891 14.699723	34	Pd 1.375323 3.970215 10.000000
O 9.625400 4.143863 14.848924	17.839089	Pd 4.125968 3.970215 10.000000
X 4.621894 1.317057 13.779380	Pd 0.000000 1.588086 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000
X 10.144110 3.708247 13.779380	Pd 2.750645 1.588086 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000
*****	Pd 5.501291 1.588086 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000
reaction-P9-reactant	Pd 8.251936 1.588086 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000
34	Pd 1.375323 3.970215 10.000000	Pd 8.251936 6.352343 10.000000
0.000000	Pd 4.125968 3.970215 10.000000	Pd 11.002582 6.352343 10.000000
Pd 0.000000 1.588086 10.000000	Pd 6.876613 3.970215 10.000000	Pd -0.129378 0.110829 12.280054
Pd 2.750645 1.588086 10.000000	Pd 9.627259 3.970215 10.000000	Pd 2.603765 0.144795 12.204163
Pd 5.501291 1.588086 10.000000	Pd 2.750645 6.352343 10.000000	Pd 5.364233 0.105069 12.174732
Pd 8.251936 1.588086 10.000000	Pd 5.501291 6.352343 10.000000	Pd 8.109711 0.074109 12.345345
Pd 1.375323 3.970215 10.000000	Pd 8.251936 6.352343 10.000000	Pd 1.263930 2.502103 12.274065
Pd 4.125968 3.970215 10.000000	Pd 11.002582 6.352343 10.000000	Pd 3.961176 2.505181 12.258717
Pd 6.876613 3.970215 10.000000	Pd -0.159163 0.115224 12.256176	Pd 6.729792 2.473917 12.444348
Pd 9.627259 3.970215 10.000000	Pd 2.576714 0.162515 12.196686	Pd 9.569445 2.533900 12.349000
Pd 2.750645 6.352343 10.000000	Pd 5.346226 0.097437 12.183111	Pd 2.678014 4.891106 12.257767
Pd 5.501291 6.352343 10.000000	Pd 8.130762 0.115335 12.253241	Pd 5.421159 4.889051 12.375176
Pd 8.251936 6.352343 10.000000	Pd 1.200210 2.528317 12.279997	Pd 8.208271 4.910836 12.411958
Pd 11.002582 6.352343 10.000000	Pd 3.905044 2.525385 12.270213	Pd 10.955437 4.845480 12.184202
Pd -0.193565 0.153459 12.252505	Pd 6.708700 2.424131 12.382940	C 5.367941 3.308581 15.057590
Pd 2.534171 0.169345 12.223945	Pd 9.507386 2.496096 12.320913	C 6.198241 3.795445 13.893255
Pd 5.304187 0.148770 12.161626	Pd 2.640547 4.908562 12.273660	H 4.706771 2.464340 14.775655

H 6.028371 2.991552 15.891434	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 4.723615 4.133365 15.429349	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
C 7.417648 4.535652 14.197345	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 8.387837 1.549061 13.147980	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
O 7.958183 4.895153 15.219784	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
X 4.621894 1.317057 13.779380	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.939111 1.022547 21.118651
X 10.144110 3.708247 13.779380	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.775072 0.551971 21.838044
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533045 0.574010 21.830836
reaction-S1-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363448 1.015692 21.105047
104	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.860170 3.259710 21.827369
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686106 2.788696 21.127655
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600483 2.810255 21.118894
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.450481 3.259643 21.798660
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.877389 8.196522 21.851156
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.685366 8.369420 21.585913
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.639743 8.708216 21.182021
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.418011 8.234615 21.840452
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.829214 10.432797 21.143492
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.747250 10.855669 21.628369
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.521091 10.950040 21.954047
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.296338 10.470538 21.123227
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	O 5.686982 11.429065 23.159930
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 6.102597 10.876545 23.947850
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	O 5.672057 7.762621 23.171207
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.817571 7.369991 23.424456
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.666664 9.949049 25.069705
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 7.683124 10.033716 25.199542
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 6.230712 10.067926 25.993925
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.465146 8.988822 24.740155
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	reaction-S1-TS
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	104
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	21.168977
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	Si 7.679180 7.679180 15.000000

Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 6.594548 11.570292 23.493486
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	O 5.940278 6.465992 22.327753
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 5.258291 5.817907 22.063200
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.265580 8.415998 23.774760
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.157024 8.587201 24.266537
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.647332 9.209135 24.003062
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 4.894290 7.503957 24.072566
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	reaction-S1-product
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	104
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	15.396429
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.937162 1.025433 21.113873	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773332 0.545411 21.848296	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534305 0.567593 21.835247	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364445 1.017232 21.105625	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.859466 3.264195 21.832198	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.692137 2.781764 21.128181	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.599485 2.807176 21.119772	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449964 3.259505 21.798002	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.871700 8.186562 21.847534	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.657100 8.087136 21.726608	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.634249 8.690760 21.174122	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.418025 8.230170 21.837474	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825728 10.426861 21.135484	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.763306 10.720922 21.548753	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.522747 10.935642 21.961043	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.296383 10.467167 21.123604	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 3.839590 5.759380 19.072500	O 5.733217 11.262217 23.156767	Si 1.919790 1.919790 17.715000

Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.939199 1.021962 21.121847	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773832 0.567247 21.832974	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533784 0.573421 21.829702	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364586 1.020192 21.107854	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861174 3.266165 21.831112	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.689917 2.831435 21.176459	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.597773 2.814756 21.121207	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449834 3.262208 21.806127	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.876896 8.194003 21.846596	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.685305 8.350786 21.566855	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.638050 8.713864 21.190644	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.418137 8.227494 21.846536	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825653 10.430042 21.145336	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.759836 10.813374 21.557256	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.521087 10.954471 21.966379	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.296223 10.464795 21.122485	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 3.839590 5.759380 19.072500	O 5.702766 11.282904 23.172378	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 6.566357 11.449075 23.588505	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	O 5.444658 5.098433 23.026459	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.541102 4.763458 23.162800	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.696526 7.898621 23.287355	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.606351 8.021373 23.752195	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.997009 8.411964 23.842995	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.421588 6.056018 23.323279	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	reaction-S2-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	142	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 3.698340 7.718140 20.419410	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 7.703400 7.681920 20.510900	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 11.589420 7.715140 20.414580	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500

Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.762036 7.389237 23.620184	H 6.340403 11.349943 30.914587
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.110053 7.491275 23.934897	H 4.666828 11.363813 30.261214
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.258269 7.740389 23.892245	reaction-S2-TS
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.543160 7.576435 23.176915	142
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.611599 7.551412 23.607619	20.469030
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.819259 11.519211 23.176960	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.084345 11.339166 23.867167	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.725606 11.665904 23.631382	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 7.693967 9.627504 29.069867	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 7.694874 8.462166 27.506591	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 8.112169 7.067080 27.437940	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.313080 8.976814 26.201477	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 5.862271 9.676108 29.700279	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 4.733568 8.845238 29.295694	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 5.475059 10.707607 30.661500	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 8.240648 11.447132 28.596687	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 9.484764 12.112797 28.966764	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 7.351502 12.335613 27.855499	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 8.794742 8.846588 30.452438	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 8.473179 8.474436 31.824310	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 10.193795 8.594139 30.116078	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.662296 7.390183 32.008954	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 9.091443 9.041709 32.559773	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 7.408460 8.676579 32.036307	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 10.458894 7.517333 30.241178	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 10.399225 8.863917 29.059085	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 1.938434 1.022627 21.111173	H 10.891697 9.183749 30.756975	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 5.774303 0.548540 21.842101	H 6.376365 11.845992 27.662753	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 9.533668 0.567109 21.833999	H 7.145222 13.277731 28.418787	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 13.363774 1.016108 21.105811	H 7.786463 12.637825 26.870787	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 1.861259 3.257726 21.820012	H 10.135771 11.433437 29.546652	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 5.687347 2.788601 21.130167	H 10.055636 12.453443 28.070458	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 9.601070 2.808600 21.118451	H 9.295925 13.016944 29.592980	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 13.449189 3.256767 21.797455	H 7.026986 10.043555 26.257912	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 1.879631 8.187240 21.862541	H 8.147979 8.901815 25.458161	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 5.679465 8.298438 21.595174	H 6.437204 8.420332 25.787158	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 9.666114 8.181033 21.670642	H 8.405529 6.700199 28.439242	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 13.422401 8.196535 21.834454	H 7.291845 6.410383 27.060381	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 1.828716 10.427815 21.151047	H 8.982544 6.927081 26.749431	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 5.758511 10.804687 21.586044	H 4.289584 8.306897 30.166367	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 9.527477 10.632313 21.665143	H 3.914820 9.455704 28.843213	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 13.301962 10.418922 21.079218	H 5.058629 8.092968 28.555591	Si 1.919790 5.759380 17.715000
N 9.822955 7.392342 23.204347	H 5.094120 10.261534 31.610757	Si 5.759380 5.759380 17.715000

Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774344 0.546228 21.845934	H 9.824057 10.944980 25.413036
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533485 0.564569 21.838055	H 11.261018 11.901962 25.892504
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363965 1.021014 21.103538	H 11.038711 11.403436 24.176171
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861451 3.259389 21.822039	H 13.579980 9.006082 25.504611
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687093 2.784857 21.128321	H 13.318191 10.289586 24.280222
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600662 2.804799 21.115005	H 13.497656 10.731957 26.014011
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449598 3.260634 21.806814	H 7.865701 9.641503 26.149546
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879344 8.179884 21.867719	H 7.336333 9.155312 24.513184
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.669854 8.300204 21.594011	H 6.580784 8.416316 25.972068
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.694545 8.143179 21.769033	H 8.796623 5.651482 26.054375
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.425556 8.182767 21.821185	H 7.225456 6.351990 26.552954
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.829491 10.425435 21.160159	H 7.519264 5.948354 24.825768
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.759846 10.800534 21.576753	H 9.412009 7.975991 29.587050
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.524673 10.579737 21.605719	H 8.223036 9.085750 28.846339
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.302636 10.405042 21.066278	H 8.556515 7.489136 28.089316
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.944028 7.622132 23.387133	H 11.181348 9.613193 29.506125
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.722098 6.942268 23.379625	H 11.550634 10.461568 27.966592
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.045045 7.655935 24.444272	H 10.018830 10.805136 28.854145
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 5.929151 7.878637 23.987881	reaction-S2-product
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.364200 7.619936 23.176186	142
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.367797 7.586321 23.434564	14.778004
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.826773 11.527262 23.163733	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.077055 11.392570 23.847529	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.729715 11.683617 23.618937	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 10.561176 8.323178 26.029533	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 8.546888 7.699630 25.541289	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 7.991915 6.346812 25.750587	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.536541 8.776043 25.538344	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 10.084679 8.941973 27.807749	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 9.019737 8.343080 28.609933	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 10.741145 10.008959 28.560704	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 11.634933 9.832859 25.507236	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 13.072291 9.968658 25.319393	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 10.912480 11.072516 25.234038	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 11.737082 6.866516 26.482919	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 12.073767 6.379771 27.822774	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 12.483682 6.122404 25.464017	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 11.830047 5.296996 27.928987	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.165165 6.486728 28.023430	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 11.520355 6.944341 28.590579	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 12.246269 5.035436 25.503072	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 12.267493 6.490727 24.442265	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 1.938724 1.025828 21.108624	H 13.583051 6.228813 25.612052	Si 5.759380 3.839590 16.357500

Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.250449 8.817005 25.830144
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 10.147341 8.609017 27.366403
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 9.421936 7.730700 28.283974
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 10.620481 9.780656 28.100676
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 11.444955 9.782695 25.067734
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 12.858433 10.118171 25.075689
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 10.582252 10.938151 24.855838
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 11.805191 6.778764 25.796696
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 12.343600 6.395168 27.107852
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 12.470073 5.968126 24.771725
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.146668 5.319028 27.325757
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.449885 6.527743 27.130201
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 11.902857 7.010007 27.907159
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 12.233834 4.885695 24.888122
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 12.206885 6.281380 23.746194
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938764 1.025562 21.108296	H 13.576324 6.070101 24.849413
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774332 0.545631 21.847209	H 9.509246 10.643125 24.873252
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533601 0.563422 21.839352	H 10.718003 11.720632 25.642768
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364233 1.018710 21.103091	H 10.770374 11.424152 23.868098
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861302 3.259114 21.821419	H 13.467098 9.205995 25.204009
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687129 2.784138 21.127744	H 13.166810 10.605538 24.118579
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600247 2.803181 21.113592	H 13.103272 10.831745 25.899340
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449930 3.257155 21.803599	H 7.719349 9.384708 26.656984
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.877996 8.182983 21.864692	H 7.072928 9.512219 24.983767
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.666942 8.303562 21.603098	H 6.267738 8.452019 26.191128
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.684483 8.110822 21.791119	H 8.366209 5.591675 25.511747
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.426569 8.192082 21.810961	H 7.435544 6.296951 26.873939
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.830518 10.431473 21.169080	H 6.665233 6.107028 25.263629
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.760493 10.802130 21.589525	H 10.015013 7.553104 29.211338
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.526223 10.524678 21.538935	H 8.447287 8.163918 28.616733
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.303732 10.408044 21.065953	H 9.229314 6.744442 27.831121
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.880869 7.555068 23.411084	H 11.279638 9.481376 28.951306
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.503142 6.732064 23.311860	H 11.194697 10.451974 27.448345
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 8.284807 7.671456 24.385654	H 9.775335 10.359015 28.549800
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 5.854948 7.765583 24.033778	*****
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.345776 7.598776 23.165267	reaction-S3-reactant
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.350402 7.435284 23.366634	142
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.821347 11.553892 23.162339	0.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.059778 11.468893 23.837854	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.714470 11.763421 23.614274	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 10.482921 8.163331 25.462981	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 8.124111 7.692473 25.414684	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 7.615022 6.354491 25.786700	Si 0.000000 3.839590 15.000000

Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.422401 8.196535 21.834454
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.828716 10.427815 21.151047
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.758511 10.804687 21.586044
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.527477 10.632313 21.665143
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301962 10.418922 21.079218
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.822955 7.392342 23.204347
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.762036 7.389237 23.620184
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.110053 7.491275 23.934897
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.258269 7.740389 23.892245
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.543160 7.576435 23.176915
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.611599 7.551412 23.607619
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.819259 11.519211 23.176960
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.084345 11.339166 23.867167
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.725606 11.665904 23.631382
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 7.693967 9.627504 29.069867
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 7.694874 8.462166 27.506591
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 8.112169 7.067080 27.437940
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.313080 8.976814 26.201477
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 5.862271 9.676108 29.700279
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 4.733568 8.845238 29.295694
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 5.475059 10.707607 30.661500
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 8.240648 11.447132 28.596687
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 9.484764 12.112797 28.966764
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 7.351502 12.335613 27.855499
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 8.794742 8.846588 30.452438
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 8.473179 8.474436 31.824310
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 10.193795 8.594139 30.116078
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.662296 7.390183 32.008954
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 9.091443 9.041709 32.559773
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 7.408460 8.676579 32.036307
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 10.458894 7.517333 30.241178
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 10.399225 8.863917 29.059085
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938434 1.022627 21.111173	H 10.891697 9.183749 30.756975
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774303 0.548540 21.842101	H 6.376365 11.845992 27.662753
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533668 0.567109 21.833999	H 7.145222 13.277731 28.418787
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363774 1.016108 21.105811	H 7.786463 12.637825 26.870787
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861259 3.257726 21.820012	H 10.135771 11.433437 29.546652
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687347 2.788601 21.130167	H 10.055636 12.453443 28.070458
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601070 2.808600 21.118451	H 9.295925 13.016944 29.592980
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449189 3.256767 21.797455	H 7.026986 10.043555 26.257912
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879631 8.187240 21.862541	H 8.147979 8.901815 25.458161
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.679465 8.298438 21.595174	H 6.437204 8.420332 25.787158
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.666114 8.181033 21.670642	H 8.405529 6.700199 28.439242

H 7.291845 6.410383 27.060381	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 8.982544 6.927081 26.749431	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 4.289584 8.306897 30.166367	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 3.914820 9.455704 28.843213	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 5.058629 8.092968 28.555591	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 5.094120 10.261534 31.610757	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938684 1.027308 21.107892
H 6.340403 11.349943 30.914587	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774251 0.546780 21.845920
H 4.666828 11.363813 30.261214	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533708 0.563641 21.839290
reaction-S3-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363995 1.017147 21.101656
142	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861458 3.260312 21.824109
23.152192	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686975 2.784467 21.127593
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600591 2.801358 21.110855
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.450356 3.254540 21.800886
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880419 8.177280 21.872553
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.676401 8.305389 21.586233
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.673907 8.203707 21.797997
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424963 8.198200 21.805642
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.828452 10.424735 21.159662
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.759508 10.805668 21.576690
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.526123 10.628444 21.664376
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.302270 10.416508 21.063467
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.764984 7.640662 23.422381
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.878795 6.608557 23.356647
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 8.947134 7.603188 24.765186
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.168091 7.780140 23.931759
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.484498 7.639927 23.185046
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.530812 7.559187 23.555585
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.819873 11.531398 23.165124
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.081692 11.356362 23.852396
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.728012 11.657954 23.620800
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 10.771333 7.995292 25.745754
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 8.394072 7.495510 25.684752
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 7.787651 6.163032 25.772590
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.512173 8.642845 25.940845
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 10.511359 8.464827 27.618509
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 9.661313 7.683875 28.522783
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 11.146997 9.551343 28.363621
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 11.948043 9.444090 25.318392
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 13.399105 9.552944 25.344497
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 11.282748 10.706785 25.017760
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 11.828459 6.412513 25.963109
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 12.288381 5.751258 27.181390
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 12.303965 5.706816 24.767972

H 11.905200 4.706428 27.243351	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 13.401140 5.688342 27.198861	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 11.955410 6.305654 28.074297	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 11.849454 4.692624 24.684224	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 12.067988 6.279155 23.850533	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 13.408484 5.570603 24.800665	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 10.177915 10.586308 25.022136	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 11.535717 11.499706 25.760729	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 11.561469 11.086540 24.007789	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 13.852555 8.567687 25.550568	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 13.795245 9.917969 24.370136	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 13.733056 10.270411 26.131820	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 7.955491 9.332799 26.688379	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 7.307982 9.229311 25.018491	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 6.538262 8.300145 26.339196	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 8.579210 5.392009 25.734723	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 7.254015 6.045068 26.736853	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 7.066494 5.953034 24.949052	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 10.239424 7.348477 29.414636	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 8.806019 8.287760 28.907171	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 9.256062 6.789721 28.021140	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 11.782253 9.152469 29.188301	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938319 1.024831 21.099348
H 11.784129 10.162646 27.704174	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774268 0.552624 21.840521
H 10.386922 10.214769 28.840791	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533742 0.564295 21.838816
reaction-S3-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364738 1.012889 21.100741
142	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.860782 3.254391 21.819385
6.605856	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686230 2.792505 21.133478
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601578 2.796972 21.097670
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.450186 3.247355 21.794825
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880851 8.191679 21.850932
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.679065 8.306939 21.588736
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.660079 8.089932 21.775820
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.423561 8.215327 21.812078
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.831783 10.442348 21.179901
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.761832 10.799863 21.579985
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.529889 10.484930 21.492823
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.304126 10.415953 21.058751
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.679684 7.519268 23.421662
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.175422 6.616630 23.489490
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 7.897844 6.753772 25.416301
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.238247 7.553572 23.874797
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.496927 7.660373 23.179448
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.566834 7.466665 23.558972

N 5.816781 11.529174 23.168355	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
H 5.073788 11.320184 23.843985	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
H 6.722541 11.591396 23.645217	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Ti 10.778856 8.047152 25.038342	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
N 7.137448 6.166134 25.791705	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
C 6.774889 5.010521 24.980782	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
C 6.069607 6.918263 26.443493	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
N 9.921755 7.977639 26.791183	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
C 9.847108 6.711086 27.528396	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
C 9.485393 9.088091 27.633035	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
N 11.407452 9.859475 24.822614	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
C 12.749796 10.404854 24.982344	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
C 10.388992 10.903305 24.782835	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
N 12.284726 6.870963 25.275066	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
C 13.044170 6.828790 26.524224	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 12.724516 5.840297 24.336346	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 12.966527 5.831939 27.018873	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 14.123999 7.016736 26.331407	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 12.682683 7.596750 27.231892	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 12.478737 4.815769 24.702126	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 12.242247 5.977138 23.350928	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 13.826727 5.876800 24.185959	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 9.370871 10.464991 24.728569	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 10.429933 11.558376 25.686109	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 10.514569 11.566646 23.893117	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 13.493320 9.588539 25.019221	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 13.017747 11.071841 24.128835	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 12.831578 11.014041 25.911787	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 6.450742 7.406547 27.362626	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 5.573071 7.710561 25.830208	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 5.274299 6.208736 26.749095	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 7.677691 4.396627 24.791662	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 6.070147 4.379469 25.555801	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 6.294323 5.232099 23.994145	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 10.451394 6.763509 28.465813	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 8.801611 6.457632 27.804129	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 10.232436 5.874014 26.916654	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 10.109386 9.163536 28.555507	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 9.553905 10.051325 27.098598	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938434 1.022627 21.111173
H 8.430966 8.957097 27.969564	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774303 0.548540 21.842101
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533668 0.567109 21.833999
reaction-S4-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363774 1.016108 21.105811
142	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861259 3.257726 21.820012

Si 5.687347 2.788601 21.130167	H 10.055636 12.453443 28.070458	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 9.601070 2.808600 21.118451	H 9.295925 13.016944 29.592980	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 13.449189 3.256767 21.797455	H 7.026986 10.043555 26.257912	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 1.879631 8.187240 21.862541	H 8.147979 8.901815 25.458161	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 5.679465 8.298438 21.595174	H 6.437204 8.420332 25.787158	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 9.666114 8.181033 21.670642	H 8.405529 6.700199 28.439242	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 13.422401 8.196535 21.834454	H 7.291845 6.410383 27.060381	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 1.828716 10.427815 21.151047	H 8.982544 6.927081 26.749431	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 5.758511 10.804687 21.586044	H 4.289584 8.306897 30.166367	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 9.527477 10.632313 21.665143	H 3.914820 9.455704 28.843213	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 13.301962 10.418922 21.079218	H 5.058629 8.092968 28.555591	Si 1.919790 5.759380 17.715000
N 9.822955 7.392342 23.204347	H 5.094120 10.261534 31.610757	Si 5.759380 5.759380 17.715000
H 10.762036 7.389237 23.620184	H 6.340403 11.349943 30.914587	Si 9.598970 5.759380 17.715000
H 9.110053 7.491275 23.934897	H 4.666828 11.363813 30.261214	Si 13.438560 5.759380 17.715000
H 6.258269 7.740389 23.892245	reaction-S4-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
N 5.543160 7.576435 23.176915	142	Si 5.759380 9.598970 17.715000
H 4.611599 7.551412 23.607619	66.771081	Si 9.598970 9.598970 17.715000
N 5.819259 11.519211 23.176960	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
H 5.084345 11.339166 23.867167	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
H 6.725606 11.665904 23.631382	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Ti 7.693967 9.627504 29.069867	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 7.694874 8.462166 27.506591	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
C 8.112169 7.067080 27.437940	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
C 7.313080 8.976814 26.201477	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 5.862271 9.676108 29.700279	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
C 4.733568 8.845238 29.295694	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
C 5.475059 10.707607 30.661500	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
N 8.240648 11.447132 28.596687	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
C 9.484764 12.112797 28.966764	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
C 7.351502 12.335613 27.855499	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 8.794742 8.846588 30.452438	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 8.473179 8.474436 31.824310	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 10.193795 8.594139 30.116078	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 8.662296 7.390183 32.008954	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 9.091443 9.041709 32.559773	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 7.408460 8.676579 32.036307	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 10.458894 7.517333 30.241178	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 10.399225 8.863917 29.059085	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 10.891697 9.183749 30.756975	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 6.376365 11.845992 27.662753	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 7.145222 13.277731 28.418787	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 7.786463 12.637825 26.870787	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 10.135771 11.433437 29.546652	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170

Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 8.501033 10.744081 28.797674	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 9.440501 11.763961 29.259618	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 7.172969 11.301016 28.525989	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 10.243856 8.174783 29.525380	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 10.337309 7.140291 30.552821	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 11.551697 8.733515 29.174528	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 10.968974 6.287932 30.211375	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 10.798780 7.539303 31.483949	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 9.331817 6.755319 30.799903	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 12.250541 7.939121 28.826171	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 11.462638 9.475892 28.357129	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 1.938726 1.026915 21.106761	H 12.026238 9.243098 30.044164	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 5.774052 0.546459 21.848275	H 6.466106 10.506687 28.212098	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 9.533558 0.565394 21.838946	H 6.749573 11.797480 29.428283	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 13.363533 1.021600 21.099308	H 7.210127 12.062911 27.715039	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 1.861488 3.260756 21.824561	H 10.425135 11.318239 29.485756	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 5.687427 2.787358 21.130794	H 9.585024 12.558046 28.492480	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 9.600808 2.810226 21.122081	H 9.070508 12.261809 30.184855	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 13.448853 3.259388 21.802940	H 8.301428 10.429385 25.952065	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 1.879604 8.185246 21.867880	H 9.364676 9.675059 24.681560	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 5.680291 8.311248 21.576918	H 7.759212 8.971915 25.039506	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 9.667497 7.912188 21.769369	H 10.476903 7.009604 26.870318	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 13.418022 8.180986 21.845305	H 7.819524 5.451319 25.511771	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 1.829744 10.424321 21.158500	H 10.651617 7.890869 25.184842	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 5.758076 10.800427 21.564438	H 6.784665 5.783649 29.308680	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 9.529934 10.476202 21.536590	H 5.723673 6.712916 28.196258	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 13.301877 10.397810 21.066880	H 7.419061 6.369450 27.732135	Si 1.919790 5.759380 17.715000
N 9.930487 7.174883 23.259886	H 6.399435 7.504143 31.157862	Si 5.759380 5.759380 17.715000
H 10.966550 7.100501 23.343029	H 6.720418 9.227930 30.783303	Si 9.598970 5.759380 17.715000
H 8.033408 5.984941 25.024677	H 5.298676 8.398094 30.060192	Si 13.438560 5.759380 17.715000
H 6.465727 7.965910 23.773336	reaction-S4-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
N 5.649115 7.682016 23.220241	142	Si 5.759380 9.598970 17.715000
H 4.784863 7.840679 23.754709	41.827515	Si 9.598970 9.598970 17.715000
N 5.815445 11.523881 23.160038	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
H 5.061474 11.374641 23.834948	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
H 6.717915 11.653195 23.625344	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Ti 8.722969 8.843859 28.571654	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 9.168505 8.569310 26.516305	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
C 10.156871 7.789346 26.163168	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
C 8.633628 9.484899 25.489621	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 7.197012 7.880547 29.217009	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
C 6.763084 6.630484 28.586250	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
C 6.365301 8.274204 30.354582	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500

Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 10.284370 7.496894 23.319937	H 8.660929 6.875963 30.564920
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 11.249870 7.240414 23.024793	H 8.933995 8.628060 30.285327
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 8.255479 6.294884 24.286066	H 7.275202 7.946139 30.168914
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.443750 8.077033 23.698766	*****
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.636997 7.684309 23.195058	reaction-S5-reactant
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.778788 7.849912 23.737836	142
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.810334 11.520970 23.158118	0.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.042934 11.400355 23.821674	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.705465 11.638610 23.639738	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 9.785941 8.668488 27.573111	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 9.553973 8.508945 25.600330	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 10.532417 7.831627 24.766480	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 8.623176 9.413531 24.955594	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 8.570224 7.501219 28.521359	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 7.795417 6.369274 28.028495	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 8.350647 7.749987 29.946135	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 9.461233 10.523765 28.077804	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 10.437917 11.579184 28.322903	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 8.095727 10.987818 28.312763	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 11.574919 8.121640 28.045989	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 12.023343 7.097860 28.985115	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 12.691155 8.787416 27.373615	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.612689 6.304341 28.469839	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 12.679825 7.531302 29.775743	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 11.155638 6.620009 29.473358	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 13.323691 8.061407 26.812175	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 12.322985 9.538894 26.645681	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 1.938658 1.024702 21.107429	H 13.353677 9.317731 28.098818	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 5.774127 0.548416 21.843438	H 7.368565 10.164401 28.167122	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 9.533728 0.565486 21.836032	H 7.965310 11.375134 29.350567	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 13.363957 1.019896 21.101314	H 7.816547 11.818282 27.619954	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 1.861257 3.258959 21.818940	H 11.466618 11.211377 28.158615	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 5.687105 2.788375 21.130378	H 10.274244 12.453727 27.649188	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 9.600686 2.807390 21.116898	H 10.377236 11.958912 29.370025	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 13.449311 3.258902 21.800747	H 8.272894 10.183662 25.669175	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 1.879671 8.186014 21.859478	H 9.059886 9.953217 24.071560	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 5.667851 8.313543 21.555847	H 7.717858 8.868547 24.606180	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 9.692626 8.130472 21.786252	H 10.793105 6.868239 25.253126	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 13.429670 8.185559 21.845100	H 7.854676 5.708320 24.523446	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 1.829411 10.427472 21.158209	H 11.473153 8.449428 24.715844	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 5.755086 10.806035 21.566410	H 8.074292 5.426661 28.553805	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 9.528427 10.557578 21.582480	H 6.701224 6.519646 28.188906	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 13.301774 10.404333 21.076445	H 7.968280 6.226621 26.946910	Si 13.438560 1.919790 17.715000

Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 10.399225 8.863917 29.059085
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938434 1.022627 21.111173	H 10.891697 9.183749 30.756975
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774303 0.548540 21.842101	H 6.376365 11.845992 27.662753
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533668 0.567109 21.833999	H 7.145222 13.277731 28.418787
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363774 1.016108 21.105811	H 7.786463 12.637825 26.870787
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861259 3.257726 21.820012	H 10.135771 11.433437 29.546652
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687347 2.788601 21.130167	H 10.055636 12.453443 28.070458
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601070 2.808600 21.118451	H 9.295925 13.016944 29.592980
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449189 3.256767 21.797455	H 7.026986 10.043555 26.257912
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879631 8.187240 21.862541	H 8.147979 8.901815 25.458161
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.679465 8.298438 21.595174	H 6.437204 8.420332 25.787158
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.666114 8.181033 21.670642	H 8.405529 6.700199 28.439242
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.422401 8.196535 21.834454	H 7.291845 6.410383 27.060381
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.828716 10.427815 21.151047	H 8.982544 6.927081 26.749431
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.758511 10.804687 21.586044	H 4.289584 8.306897 30.166367
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.527477 10.632313 21.665143	H 3.914820 9.455704 28.843213
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301962 10.418922 21.079218	H 5.058629 8.092968 28.555591
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.822955 7.392342 23.204347	H 5.094120 10.261534 31.610757
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.762036 7.389237 23.620184	H 6.340403 11.349943 30.914587
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.110053 7.491275 23.934897	H 4.666828 11.363813 30.261214
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.258269 7.740389 23.892245	reaction-S5-TS
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.543160 7.576435 23.176915	142
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.611599 7.551412 23.607619	85.431831
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.819259 11.519211 23.176960	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.084345 11.339166 23.867167	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.725606 11.665904 23.631382	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 7.693967 9.627504 29.069867	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 7.694874 8.462166 27.506591	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 8.112169 7.067080 27.437940	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.313080 8.976814 26.201477	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 5.862271 9.676108 29.700279	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 4.733568 8.845238 29.295694	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 5.475059 10.707607 30.661500	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 8.240648 11.447132 28.596687	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 9.484764 12.112797 28.966764	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 7.351502 12.335613 27.855499	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 8.794742 8.846588 30.452438	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 8.473179 8.474436 31.824310	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 10.193795 8.594139 30.116078	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.662296 7.390183 32.008954	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 9.091443 9.041709 32.559773	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 7.408460 8.676579 32.036307	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 10.458894 7.517333 30.241178	Si 13.438560 0.000000 16.357500

Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 8.886119 9.213831 26.709238
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 9.843189 8.578157 25.844896
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.771063 9.807479 25.981049
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 8.427773 8.390333 29.741654
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 7.709652 7.166262 29.420198
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 8.344199 8.717498 31.165664
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 8.783907 11.456071 29.027220
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 9.610487 12.636586 29.250545
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 7.365305 11.741101 29.236639
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 11.242514 9.442758 28.798459
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 12.016971 8.653559 29.748297
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 12.083837 10.244798 27.912860
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.719987 7.962381 29.227048
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 12.631939 9.300740 30.415209
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 11.342129 8.047161 30.379457
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 12.797860 9.611242 27.337839
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 11.464208 10.797845 27.177559
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938647 1.024805 21.108661	H 12.684424 10.999002 28.474445
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774048 0.548290 21.843816	H 6.757715 10.819998 29.128079
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533664 0.566065 21.835665	H 7.173771 12.148303 30.258844
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363935 1.018660 21.103916	H 6.979691 12.494455 28.507566
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861299 3.258958 21.820841	H 10.678734 12.403602 29.096085
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687210 2.788243 21.130880	H 9.335423 13.470180 28.560419
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600828 2.807575 21.117472	H 9.495166 13.024858 30.290726
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449358 3.258393 21.800701	H 7.197217 10.498538 26.627530
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879057 8.186065 21.861945	H 8.111831 10.384533 25.086791
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.677657 8.324422 21.588461	H 7.066426 9.016345 25.628907
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.669948 8.103785 21.708047	H 10.471271 7.818099 26.350228
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.421105 8.185881 21.844750	H 9.417176 7.529560 24.755667
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.829085 10.429115 21.159764	H 10.561631 9.307535 25.373596
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.759759 10.814723 21.568359	H 8.123421 6.293600 29.977377
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.526859 10.549356 21.567870	H 6.629897 7.240312 29.690858
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.302062 10.403787 21.071033	H 7.782006 6.951733 28.338600
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.913431 7.678762 23.372487	H 8.820455 7.929535 31.794946
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.928407 7.547643 23.551129	H 8.857407 9.674524 31.378201
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.560326 8.449005 24.508991	H 7.286421 8.814063 31.506558
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.271240 8.120757 23.892314	reaction-S5-product
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.585961 7.734217 23.232526	142
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.656114 7.706490 23.667912	3.951700
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.816224 11.527835 23.161593	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.084994 11.325906 23.850760	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.723360 11.658470 23.618595	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 9.334043 9.642521 28.576947	Si 11.518770 0.000000 15.000000

Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.665298 8.112351 21.669523
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.421453 8.189608 21.841876
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.829236 10.429513 21.161094
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.754131 10.827987 21.576800
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.528045 10.585116 21.639934
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.303250 10.411253 21.076705
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.821540 7.246005 23.151119
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.739631 7.210839 23.610318
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.097218 8.807440 25.010815
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.224525 8.145195 23.940868
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.592515 7.725867 23.246742
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.649713 7.654437 23.650661
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.770488 11.580631 23.149063
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 4.986733 11.459530 23.798505
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.652283 11.691936 23.656353
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 8.820590 9.957115 28.787461
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 8.531073 9.629540 26.895082
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 9.540609 9.072286 25.993007
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.340465 10.087992 26.197776
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 8.010878 8.466206 29.716684
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 7.419117 7.228323 29.226948
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 7.915357 8.593919 31.169566
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 7.938797 11.635819 29.282800
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 8.566704 12.938744 29.471384
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 6.508888 11.680965 29.565387
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 10.735012 9.921937 29.072103
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 11.535331 9.050220 29.926595
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 11.551177 10.890835 28.346505
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.276562 8.463679 29.332357
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 12.113297 9.632111 30.684383
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 10.884973 8.335275 30.461077
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 12.316324 10.387017 27.710031
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 10.922501 11.515676 27.678822
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938517 1.024343 21.110138	H 12.095132 11.578360 29.037516
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774192 0.548298 21.842706	H 6.060307 10.671671 29.480977
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533584 0.566889 21.833633	H 6.303525 12.058212 30.595035
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363944 1.017697 21.105259	H 5.967931 12.357263 28.861337
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861002 3.259308 21.820259	H 9.655801 12.883668 29.281530
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687254 2.788449 21.130891	H 8.137767 13.709085 28.786621
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601073 2.808818 21.118254	H 8.424611 13.315815 30.513682
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449330 3.258338 21.799340	H 6.661845 10.622449 26.886286
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879465 8.185281 21.864193	H 7.589419 10.786431 25.360831
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.682022 8.330852 21.602942	H 6.761202 9.233522 25.757475

H 10.014937 8.164601 26.416818	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 9.061870 7.088657 23.819530	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 10.356311 9.798540 25.766366	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 7.931635 6.333099 29.652202	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 6.341082 7.145299 29.507419	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 7.496516 7.179534 28.125697	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 8.467784 7.776531 31.695409	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 8.344978 9.559691 31.507486	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938434 1.022627 21.111173
H 6.855501 8.555688 31.521877	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774303 0.548540 21.842101
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533668 0.567109 21.833999
reaction-S6-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363774 1.016108 21.105811
142	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861259 3.257726 21.820012
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687347 2.788601 21.130167
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601070 2.808600 21.118451
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449189 3.256767 21.797455
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879631 8.187240 21.862541
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.679465 8.298438 21.595174
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.666114 8.181033 21.670642
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.422401 8.196535 21.834454
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.828716 10.427815 21.151047
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.758511 10.804687 21.586044
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.527477 10.632313 21.665143
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301962 10.418922 21.079218
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.822955 7.392342 23.204347
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.762036 7.389237 23.620184
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.110053 7.491275 23.934897
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.258269 7.740389 23.892245
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.543160 7.576435 23.176915
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.611599 7.551412 23.607619
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.819259 11.519211 23.176960
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.084345 11.339166 23.867167
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.725606 11.665904 23.631382
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 7.693967 9.627504 29.069867
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 7.694874 8.462166 27.506591
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 8.112169 7.067080 27.437940
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 7.313080 8.976814 26.201477
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 5.862271 9.676108 29.700279
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 4.733568 8.845238 29.295694
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 5.475059 10.707607 30.661500
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 8.240648 11.447132 28.596687
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 9.484764 12.112797 28.966764
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 7.351502 12.335613 27.855499
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 8.794742 8.846588 30.452438

C 8.473179 8.474436 31.824310	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 10.193795 8.594139 30.116078	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 8.662296 7.390183 32.008954	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 9.091443 9.041709 32.559773	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 7.408460 8.676579 32.036307	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 10.458894 7.517333 30.241178	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 10.399225 8.863917 29.059085	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 10.891697 9.183749 30.756975	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 6.376365 11.845992 27.662753	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 7.145222 13.277731 28.418787	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 7.786463 12.637825 26.870787	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 10.135771 11.433437 29.546652	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 10.055636 12.453443 28.070458	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 9.295925 13.016944 29.592980	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 7.026986 10.043555 26.257912	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 8.147979 8.901815 25.458161	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 6.437204 8.420332 25.787158	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 8.405529 6.700199 28.439242	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 7.291845 6.410383 27.060381	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 8.982544 6.927081 26.749431	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 4.289584 8.306897 30.166367	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 3.914820 9.455704 28.843213	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 5.058629 8.092968 28.555591	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 5.094120 10.261534 31.610757	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938633 1.025771 21.108414
H 6.340403 11.349943 30.914587	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774187 0.546357 21.845586
H 4.666828 11.363813 30.261214	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533569 0.564593 21.837581
reaction-S6-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363769 1.020053 21.102647
142	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861246 3.259768 21.821925
87.961060	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687101 2.785797 21.128532
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601100 2.805841 21.115347
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449071 3.259598 21.803198
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.878610 8.183077 21.866435
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.667447 8.311231 21.599198
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.673333 8.068459 21.742454
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.418789 8.178130 21.852177
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.830170 10.425959 21.157979
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.755339 10.811187 21.580226
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.529875 10.547805 21.586124
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.302877 10.399642 21.073240
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 10.005199 7.235400 23.194303
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 11.027877 7.137232 23.334046
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.725646 8.275040 24.406061
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 5.990184 7.884304 23.997055

N 5.393960 7.655636 23.197363	142	Si 5.759380 9.598970 17.715000
H 4.409052 7.602502 23.490905	9.995086	Si 9.598970 9.598970 17.715000
N 5.776590 11.575307 23.151889	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
H 4.995421 11.450928 23.801014	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
H 6.659431 11.701226 23.654055	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Ti 10.286474 9.146381 27.154932	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 9.506284 8.758006 25.345042	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
C 9.194253 6.446172 25.256546	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
C 8.257041 9.492774 25.088548	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 8.957320 8.794671 28.519894	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
C 7.770259 7.955762 28.377230	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
C 9.048572 9.389403 29.853438	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
N 10.814377 11.001928 27.359200	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
C 12.162244 11.559071 27.395027	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
C 9.794534 12.047593 27.436614	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 11.817609 8.065776 27.561748	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 12.103340 7.274588 28.754290	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 12.914719 8.037481 26.594088	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 12.278559 6.204943 28.496131	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 13.019934 7.639723 29.271430	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 11.257620 7.328011 29.462445	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 13.159229 6.993046 26.296792	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 12.664993 8.583999 25.660585	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 13.844164 8.487115 27.014038	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 8.779541 11.609866 27.460801	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 9.913660 12.658682 28.361582	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 9.848856 12.745826 26.569461	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 12.920070 10.756572 27.337242	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 12.335908 12.262497 26.547673	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 12.339576 12.131323 28.336202	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 7.977474 10.192658 25.901731	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 8.352308 10.077338 24.145685	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 7.409817 8.788383 24.945425	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 9.348254 6.574121 26.330179	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 8.152449 6.459169 24.921023	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 9.820792 5.682147 24.793922	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 7.771524 7.117676 29.113368	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 6.834716 8.538656 28.548898	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 7.710721 7.516811 27.364779	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 9.133340 8.604932 30.641782	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938514 1.023854 21.108620
H 9.935982 10.045537 29.926694	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774078 0.546699 21.843840
H 8.145266 9.996929 30.093859	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533623 0.564176 21.836572
reaction-S6-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364054 1.018207 21.105009

Si 1.860986 3.258440 21.817714	H 12.856742 11.415085 27.401978	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 5.687066 2.785754 21.128482	H 12.334089 12.913242 26.557363	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 9.601218 2.803688 21.112351	H 12.293349 12.830895 28.347571	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 13.449270 3.258943 21.801639	H 7.939604 10.956185 25.563928	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 1.878925 8.186711 21.860639	H 8.543083 10.791756 23.872656	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 5.681521 8.344922 21.596405	H 7.512293 9.503619 24.612282	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 9.668777 8.074235 21.710136	H 9.511424 7.001595 25.214675	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 13.421626 8.176862 21.861451	H 8.270917 6.421833 24.053202	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 1.830725 10.428224 21.159398	H 9.744061 5.450576 24.351932	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 5.747873 10.836485 21.580457	H 7.520581 7.845574 28.792526	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 9.530873 10.544983 21.584910	H 6.652850 9.309551 28.228009	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 13.304313 10.399026 21.078214	H 7.606188 8.319124 27.061464	Si 13.438560 1.919790 17.715000
N 10.046513 7.140402 23.129321	H 8.800085 9.259427 30.477473	Si 1.919790 5.759380 17.715000
H 11.074691 7.095592 23.237153	H 9.675119 10.703844 29.862030	Si 5.759380 5.759380 17.715000
H 9.810458 8.861446 24.607843	H 7.878575 10.686285 29.904451	Si 9.598970 5.759380 17.715000
H 6.161429 8.112584 23.962908	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
N 5.562381 7.726276 23.227198	reaction-S7-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
H 4.619182 7.536624 23.587193	142	Si 5.759380 9.598970 17.715000
N 5.722151 11.618273 23.139453	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
H 4.918921 11.502098 23.763098	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
H 6.585993 11.743561 23.673163	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Ti 10.229350 9.852813 27.117383	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
N 9.513740 9.541110 25.325241	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
C 9.357357 6.484524 24.248794	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
C 8.336184 10.228243 24.827733	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
N 8.777437 9.515897 28.352604	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
C 7.588095 8.713681 28.093812	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
C 8.784582 10.066594 29.707300	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
N 10.757510 11.711528 27.364981	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
C 12.117843 12.237283 27.418598	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
C 9.765521 12.782602 27.357719	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
N 11.698682 8.682765 27.575533	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
C 11.879795 7.870030 28.775924	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 12.855224 8.617819 26.678826	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 12.025302 6.795332 28.521404	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 12.777871 8.192541 29.354882	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 10.996333 7.951564 29.430586	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 13.091250 7.565648 26.398465	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 12.668131 9.176954 25.739330	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 13.771044 9.046426 27.151887	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 8.739276 12.367656 27.329523	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 9.842560 13.414137 28.275476	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 9.886721 13.461989 26.480427	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960

Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 4.733568 8.845238 29.295694	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 5.475059 10.707607 30.661500	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 8.240648 11.447132 28.596687	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 9.484764 12.112797 28.966764	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 7.351502 12.335613 27.855499	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 8.794742 8.846588 30.452438	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 8.473179 8.474436 31.824310	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 10.193795 8.594139 30.116078	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.662296 7.390183 32.008954	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 9.091443 9.041709 32.559773	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 7.408460 8.676579 32.036307	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 10.458894 7.517333 30.241178	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 10.399225 8.863917 29.059085	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 1.938434 1.022627 21.111173	H 10.891697 9.183749 30.756975	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 5.774303 0.548540 21.842101	H 6.376365 11.845992 27.662753	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 9.533668 0.567109 21.833999	H 7.145222 13.277731 28.418787	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 13.363774 1.016108 21.105811	H 7.786463 12.637825 26.870787	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 1.861259 3.257726 21.820012	H 10.135771 11.433437 29.546652	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 5.687347 2.788601 21.130167	H 10.055636 12.453443 28.070458	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 9.601070 2.808600 21.118451	H 9.295925 13.016944 29.592980	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 13.449189 3.256767 21.797455	H 7.026986 10.043555 26.257912	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 1.879631 8.187240 21.862541	H 8.147979 8.901815 25.458161	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 5.679465 8.298438 21.595174	H 6.437204 8.420332 25.787158	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 9.666114 8.181033 21.670642	H 8.405529 6.700199 28.439242	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 13.422401 8.196535 21.834454	H 7.291845 6.410383 27.060381	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 1.828716 10.427815 21.151047	H 8.982544 6.927081 26.749431	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 5.758511 10.804687 21.586044	H 4.289584 8.306897 30.166367	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 9.527477 10.632313 21.665143	H 3.914820 9.455704 28.843213	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 13.301962 10.418922 21.079218	H 5.058629 8.092968 28.555591	Si 1.919790 5.759380 17.715000
N 9.822955 7.392342 23.204347	H 5.094120 10.261534 31.610757	Si 5.759380 5.759380 17.715000
H 10.762036 7.389237 23.620184	H 6.340403 11.349943 30.914587	Si 9.598970 5.759380 17.715000
H 9.110053 7.491275 23.934897	H 4.666828 11.363813 30.261214	Si 13.438560 5.759380 17.715000
H 6.258269 7.740389 23.892245	reaction-S7-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
N 5.543160 7.576435 23.176915	142	Si 5.759380 9.598970 17.715000
H 4.611599 7.551412 23.607619	96.865185	Si 9.598970 9.598970 17.715000
N 5.819259 11.519211 23.176960	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
H 5.084345 11.339166 23.867167	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
H 6.725606 11.665904 23.631382	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Ti 7.693967 9.627504 29.069867	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 7.694874 8.462166 27.506591	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
C 8.112169 7.067080 27.437940	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
C 7.313080 8.976814 26.201477	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 5.862271 9.676108 29.700279	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500

Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.527202 10.609510 21.659534	H 8.094798 9.764718 29.320258
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.302744 10.417094 21.086902	H 8.044216 8.313201 28.254814
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.925768 7.205648 23.116065	H 10.898903 9.025888 30.553133
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.889243 7.218574 23.482625	H 11.834768 9.872017 29.275254
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 9.222166 6.852653 24.181110	H 10.383652 10.649863 29.985546
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.186912 7.716740 23.953986	reaction-S7-product
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.472261 7.716164 23.223830	142
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.528238 7.571184 23.594131	20.188314
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.815468 11.545582 23.161548	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.059496 11.410124 23.838360	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.716864 11.672810 23.631634	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 10.806373 8.750092 26.886959	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 9.397506 8.633664 25.711241	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 8.535322 6.162801 25.112761	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 8.232756 9.218945 25.149228	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 9.986846 9.054655 28.609519	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 8.619268 8.814968 29.052506	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 10.808670 9.675546 29.649513	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 11.788818 10.377793 26.280865	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 13.003033 10.396636 25.483633	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 11.270022 11.715908 26.531446	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 11.891304 7.089192 26.944469	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 12.235170 6.319229 28.133585	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 12.530067 6.553194 25.749182	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 11.919798 5.253066 28.032552	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.337429 6.310264 28.313162	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 11.738435 6.742658 29.025352	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 12.256859 5.485567 25.584327	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 12.233963 7.127220 24.849114	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 1.938548 1.025498 21.110885	H 13.643105 6.598584 25.809889	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 5.773910 0.548648 21.842540	H 10.374189 11.670614 27.180070	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 9.533989 0.567536 21.833296	H 12.028893 12.365539 27.027111	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 13.363454 1.017024 21.108278	H 10.982717 12.223934 25.580177	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 1.861313 3.260813 21.822318	H 13.365651 9.371397 25.280986	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 5.687057 2.788452 21.131294	H 12.843006 10.901981 24.498076	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 9.601715 2.810002 21.119900	H 13.819345 10.955445 26.002132	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 13.448962 3.259408 21.800376	H 8.280065 10.331248 25.266963	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 1.879486 8.182400 21.867957	H 8.123000 9.022156 24.052536	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 5.676625 8.310050 21.609874	H 7.288203 8.886854 25.645994	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 9.652937 8.102714 21.714054	H 9.152972 5.897743 25.983010	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 13.420154 8.188795 21.832823	H 7.585168 6.626826 25.413402	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 1.830329 10.425902 21.158257	H 8.378485 5.300364 24.438031	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 5.760694 10.815896 21.580754	H 8.593696 8.165696 29.960347	Si 9.598970 1.919790 17.715000

Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 12.935453 5.692219 25.344601
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 13.034255 7.268268 24.483472
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938105 1.027437 21.110350	H 14.224475 6.873568 25.752915
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773872 0.548519 21.844314	H 10.367507 11.479068 25.443612
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533843 0.566053 21.837550	H 11.839968 12.453313 25.761954
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363661 1.019814 21.105958	H 11.497012 11.830945 24.105903
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861323 3.263212 21.829140	H 14.135782 9.560677 25.568713
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686736 2.785503 21.125811	H 13.849649 10.730435 24.237359
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601037 2.805273 21.113701	H 14.032615 11.320957 25.921818
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449933 3.261837 21.807584	H 8.230161 9.446423 25.489681
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.882593 8.175393 21.875916	H 7.928613 9.101346 23.756823
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.680659 8.288605 21.599855	H 7.757616 7.794091 24.985489
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.680103 8.370044 21.670202	H 9.296517 4.779680 25.811699
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.425545 8.214387 21.812579	H 7.655676 4.625765 25.080301
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.827803 10.416250 21.146247	H 9.084046 3.952653 24.226610
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.761482 10.809739 21.586323	H 9.484431 7.956138 29.114707
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.522716 10.832081 21.851059	H 8.160244 8.648834 28.118161
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.297303 10.443700 21.088943	H 9.250127 7.405385 27.423211
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 10.073578 7.771405 23.326071	H 10.462868 10.261635 29.497289
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 11.017192 7.348767 23.365936	H 10.827853 11.274857 28.060329
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 8.877967 5.738265 24.351386	H 9.121193 10.975883 28.545010
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 6.284124 7.230957 23.742847	*****
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.511027 7.538401 23.153427	reaction-1-reactant
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 4.593180 7.408433 23.585859	132
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 5.827633 11.537831 23.170944	0.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 5.119308 11.329097 23.879865	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.743534 11.696412 23.599918	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 11.109083 8.845742 26.031589	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	N 9.769573 8.363725 24.562086	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 8.725505 4.776423 24.865667	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 8.355554 8.688505 24.695270	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	N 10.121493 9.338650 27.606125	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 9.215843 8.294889 28.087328	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	C 10.134213 10.517972 28.462541	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	N 12.176963 10.362534 25.514793	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 13.613402 10.497433 25.302478	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 11.441475 11.584853 25.192014	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	N 12.285447 7.384930 26.481487	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	C 12.463926 6.767967 27.795092	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 13.150515 6.777034 25.474027	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.231233 5.679347 27.767062	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.519266 6.867823 28.140510	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 11.811533 7.248589 28.546026	Si 5.759380 0.000000 16.357500

Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 10.794264 8.174893 25.006312
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 9.745396 8.416169 26.608835
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 8.791698 7.348104 26.903258
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 9.869325 9.383364 27.689195
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 11.769754 9.839437 24.842966
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 13.182660 10.126400 25.047053
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 10.990581 11.063289 24.667410
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 12.069454 6.812316 25.495611
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 12.503646 6.554191 26.867120
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 12.615788 5.823837 24.566958
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 12.194459 5.538920 27.208396
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 13.614732 6.598471 26.941082
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 12.080759 7.302812 27.559544
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 12.329165 4.787562 24.860887
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.250136 6.001267 23.538831
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.728776 5.863991 24.542685
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 9.919749 10.832478 24.489132
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 11.048733 11.724273 25.563552
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 11.356464 11.657671 23.796962
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938664 1.025474 21.108036	H 13.749867 9.190232 25.184066
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774305 0.546243 21.845583	H 13.613823 10.665772 24.167225
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533699 0.562880 21.839077	H 13.339599 10.780678 25.937954
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364182 1.015037 21.101554	H 9.035131 6.833374 27.861631
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861340 3.259193 21.820771	H 7.748643 7.729493 26.982978
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687068 2.786426 21.131003	H 8.805402 6.574939 26.106825
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600931 2.802451 21.112522	H 10.205195 8.893043 28.635720
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449834 3.252001 21.796150	H 10.611488 10.158257 27.429754
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879247 8.187844 21.859493	H 8.900372 9.886179 27.913641
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.681409 8.312801 21.598117	reaction-1-TS
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.663761 8.118000 21.745479	132
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.422150 8.201213 21.815513	29.890243
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.830600 10.431924 21.165120	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.755022 10.804306 21.580634	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.528369 10.514130 21.499179	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.304443 10.409310 21.060200	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.690662 7.647118 23.411061	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.913028 7.006309 23.645438	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 6.175176 8.032508 23.955041	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.550031 7.670425 23.225268	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 4.592657 7.604971 23.597148	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.790340 11.544344 23.162589	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.999953 11.441689 23.805670	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.674144 11.618843 23.674300	Si 11.518770 7.679180 15.000000

Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 6.019152 7.299562 25.146218
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.988831 7.827729 23.386298
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 5.026629 7.838879 23.791536
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.714865 11.738136 23.085534
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.903783 11.722240 23.709094
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.572643 12.002197 23.575932
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 8.279790 7.484172 24.892563
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 6.393376 6.652846 25.885470
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 5.974885 5.283716 25.497495
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 5.833640 7.060370 27.192877
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 8.571866 9.175286 25.725736
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 9.561655 9.602295 26.707841
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 7.781210 10.289927 25.204464
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 9.482630 6.381970 25.923965
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 9.240279 6.094225 27.339051
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 10.722342 5.739695 25.478469
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.055481 5.009051 27.509522
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 10.128318 6.371545 27.951520
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 8.377361 6.661070 27.722680
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 10.664455 4.632786 25.590066
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 10.925521 5.987850 24.424996
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 11.585036 6.084436 26.092604
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 7.049924 9.925536 24.456535
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 7.214923 10.797091 26.021641
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 8.438436 11.050000 24.715413
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938029 1.028008 21.107523	H 10.157573 8.742982 27.054662
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773745 0.544270 21.848903	H 10.254302 10.353589 26.266284
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533857 0.562377 21.839872	H 9.073377 10.083040 27.586995
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364257 1.021080 21.102127	H 6.232298 4.579401 26.309661
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861359 3.261548 21.827044	H 4.882674 5.225212 25.304436
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.685939 2.777215 21.117273	H 6.501964 4.970815 24.577751
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.602035 2.798114 21.108327	H 6.186119 6.376953 27.989031
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449761 3.259895 21.804268	H 6.167959 8.086212 27.435558
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881501 8.177460 21.859333	H 4.722220 7.034393 27.186174
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.769131 8.289045 21.737014	reaction-1-product
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.626418 8.221073 21.685843	132
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424671 8.193624 21.830026	21.929482
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.828104 10.424016 21.152868	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.749394 10.854760 21.583940	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.531322 10.659881 21.726364	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.302254 10.415392 21.078068	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.225083 7.394240 23.198473	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.963336 6.431896 22.881553	Si 3.839590 3.839590 15.000000

Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.827641 10.422781 21.154609
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.754866 10.850197 21.589644
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.529170 10.694920 21.757799
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301745 10.421415 21.083020
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.007072 7.436965 23.141298
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.796672 6.481271 22.768271
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.381493 7.608813 25.451124
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.990538 7.839153 23.403398
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 5.026464 7.694977 23.762092
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.735075 11.722008 23.097412
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.921523 11.745978 23.715715
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.596562 11.991459 23.576346
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 7.755346 7.411507 24.663209
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 5.826680 6.831819 25.978390
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 5.156196 5.570724 25.569138
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 5.568268 7.134201 27.408941
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 8.282667 8.918457 25.730764
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 9.378604 8.968940 26.696140
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 7.689668 10.234258 25.507171
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 8.725410 5.906067 25.502409
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 8.413130 5.335853 26.816378
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 9.858325 5.155003 24.949966
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 7.976125 4.312199 26.744708
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 9.346318 5.237072 27.421457
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 7.724951 5.975786 27.383645
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 9.595350 4.084490 24.777580
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 10.209953 5.597021 24.003481
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 10.716063 5.159904 25.663028
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 6.874723 10.165752 24.766225
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 7.270873 10.653122 26.453535
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 8.447335 10.962569 25.128800
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.937941 1.028031 21.109289	H 9.795710 7.961190 26.858362
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773769 0.543532 21.848790	H 10.192938 9.627955 26.332056
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533879 0.562558 21.838620	H 9.036066 9.382733 27.672794
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364036 1.021246 21.102937	H 5.493526 4.758532 26.238382
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861210 3.262348 21.828994	H 4.048877 5.639546 25.634472
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686424 2.777715 21.118704	H 5.437213 5.317622 24.532031
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601349 2.800623 21.114529	H 5.916129 6.303923 28.044470
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449780 3.260287 21.802248	H 6.112700 8.052716 27.694240
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881975 8.175383 21.865531	H 4.482608 7.276343 27.607692
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.787855 8.302831 21.729346	*****
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.609777 8.256814 21.696725	reaction-2-reactant
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.426469 8.196799 21.824809	132

0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687068 2.786426 21.131003
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600931 2.802451 21.112522
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449834 3.252001 21.796150
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879247 8.187844 21.859493
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.681409 8.312801 21.598117
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.663761 8.118000 21.745479
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.422150 8.201213 21.815513
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.830600 10.431924 21.165120
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.755022 10.804306 21.580634
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.528369 10.514130 21.499179
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.304443 10.409310 21.060200
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.690662 7.647118 23.411061
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.913028 7.006309 23.645438
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 6.175176 8.032508 23.955041
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.550031 7.670425 23.225268
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 4.592657 7.604971 23.597148
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.790340 11.544344 23.162589
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.999953 11.441689 23.805670
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.674144 11.618843 23.674300
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 10.794264 8.174893 25.006312
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 9.745396 8.416169 26.608835
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 8.791698 7.348104 26.903258
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 9.869325 9.383364 27.689195
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 11.769754 9.839437 24.842966
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 13.182660 10.126400 25.047053
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 10.990581 11.063289 24.667410
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 12.069454 6.812316 25.495611
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 12.503646 6.554191 26.867120
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 12.615788 5.823837 24.566958
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 12.194459 5.538920 27.208396
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 13.614732 6.598471 26.941082
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 12.080759 7.302812 27.559544
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 12.329165 4.787562 24.860887
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.250136 6.001267 23.538831
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.728776 5.863991 24.542685
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 9.919749 10.832478 24.489132
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 11.048733 11.724273 25.563552
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 11.356464 11.657671 23.796962
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938664 1.025474 21.108036	H 13.749867 9.190232 25.184066
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774305 0.546243 21.845583	H 13.613823 10.665772 24.167225
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533699 0.562880 21.839077	H 13.339599 10.780678 25.937954
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364182 1.015037 21.101554	H 9.035131 6.833374 27.861631
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861340 3.259193 21.820771	H 7.748643 7.729493 26.982978

H 8.805402 6.574939 26.106825	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 10.205195 8.893043 28.635720	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938097 1.027774 21.104563
H 10.611488 10.158257 27.429754	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773978 0.544463 21.849836
H 8.900372 9.886179 27.913641	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533873 0.558639 21.845382
reaction-2-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364514 1.023863 21.097821
132	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861319 3.259857 21.823131
35.061666	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687096 2.780262 21.121878
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.599988 2.795185 21.105509
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449453 3.260841 21.807417
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880355 8.186466 21.845517
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.758241 8.237227 21.771710
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.627000 8.129233 21.684742
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424187 8.180397 21.845543
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.830055 10.430679 21.156099
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.757701 10.796066 21.600062
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.536545 10.517949 21.502969
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.305067 10.393085 21.068089
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.025787 7.567780 23.241087
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.183676 6.979461 23.028922
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 6.059916 8.689780 25.436616
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 6.028943 7.718558 23.386669
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 5.124289 7.491825 23.843702
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.750298 11.644902 23.126932
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.931476 11.651596 23.739480
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.603616 11.910489 23.620263
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 8.565891 7.956013 25.053605
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 6.643436 8.296600 26.208827
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 5.999245 6.995919 26.557330
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 6.594473 9.235409 27.363234
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 9.548842 9.515753 25.535073
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 10.776900 9.747143 26.282858
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 8.948221 10.737054 25.009997
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 9.474895 6.556960 25.970852
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 9.404771 6.538073 27.433315
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 10.308724 5.471133 25.453783
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 8.915357 5.609994 27.808968
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 10.423548 6.578393 27.881233
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 8.842626 7.410225 27.819891
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 9.904798 4.478787 25.755990
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 10.354891 5.521745 24.353188
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 11.343351 5.545278 25.853862
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.048119 10.498425 24.399897
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 8.635305 11.433458 25.822717

H 9.648807 11.292327 24.346072	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 11.192658 8.787817 26.637236	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 11.544144 10.240868 25.643773	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 10.598706 10.409881 27.160744	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 6.414486 6.622187 27.509674	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 4.898027 7.091615 26.663025	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 6.204791 6.261537 25.756392	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 6.975775 8.727974 28.268311	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938352 1.023894 21.107053
H 7.226908 10.116636 27.161441	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774103 0.541723 21.853380
H 5.558183 9.572840 27.568124	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533895 0.558451 21.843129
reaction-2-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364932 1.020658 21.100785
132	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861301 3.257894 21.818284
18.549418	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686605 2.781551 21.128573
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600572 2.796490 21.109210
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449158 3.258050 21.800472
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880822 8.191695 21.839490
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.785482 8.335083 21.737783
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.615941 8.049262 21.728331
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424064 8.174454 21.841459
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.831480 10.432465 21.164449
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.745977 10.830048 21.590158
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.533041 10.421940 21.398331
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.305298 10.384505 21.066336
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.018228 7.393975 23.242278
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.410692 6.611968 22.913931
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.507413 9.863956 25.071049
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 6.141276 7.949861 23.406098
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 5.269219 7.857936 23.955036
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.650031 11.571442 23.200333
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.759840 12.038166 23.405778
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.409503 12.198099 23.486321
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 7.807295 8.103134 24.644345
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 5.794226 9.365440 25.929076
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 4.648696 8.544523 26.388587
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 6.103385 10.400473 26.939943
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 8.896679 9.603836 25.237079
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 9.933294 9.512503 26.262389
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 8.836363 10.927303 24.643001
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 7.974078 6.693790 25.954804
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 7.562755 6.871138 27.345648
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 8.501347 5.347935 25.726536
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 6.721881 6.192048 27.622418
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.408163 6.645340 28.035965

H 7.246037 7.911487 27.535146	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 7.723793 4.570361 25.906545	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 8.873550 5.242052 24.694280	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 9.349005 5.134284 26.416379	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 8.061259 10.961155 23.855548	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 8.592926 11.722599 25.390313	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 9.806132 11.230138 24.174693	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 9.955447 8.500573 26.702687	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 10.939411 9.719473 25.831003	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 9.767008 10.254329 27.079200	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 4.854532 8.175471 27.409443	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 3.686903 9.101510 26.411265	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 4.516823 7.660093 25.739604	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 6.433496 9.916229 27.880791	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 6.923328 11.042532 26.577723	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938664 1.025474 21.108036
H 5.224879 11.039999 27.178866	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774305 0.546243 21.845583
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533699 0.562880 21.839077
reaction-3-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364182 1.015037 21.101554
132	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861340 3.259193 21.820771
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687068 2.786426 21.131003
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600931 2.802451 21.112522
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449834 3.252001 21.796150
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879247 8.187844 21.859493
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.681409 8.312801 21.598117
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.663761 8.118000 21.745479
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.422150 8.201213 21.815513
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.830600 10.431924 21.165120
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.755022 10.804306 21.580634
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.528369 10.514130 21.499179
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.304443 10.409310 21.060200
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.690662 7.647118 23.411061
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.913028 7.006309 23.645438
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 6.175176 8.032508 23.955041
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.550031 7.670425 23.225268
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 4.592657 7.604971 23.597148
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.790340 11.544344 23.162589
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.999953 11.441689 23.805670
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.674144 11.618843 23.674300
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 10.794264 8.174893 25.006312
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 9.745396 8.416169 26.608835
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 8.791698 7.348104 26.903258
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 9.869325 9.383364 27.689195
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 11.769754 9.839437 24.842966

C 13.182660 10.126400 25.047053	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
C 10.990581 11.063289 24.667410	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
N 12.069454 6.812316 25.495611	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
C 12.503646 6.554191 26.867120	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
C 12.615788 5.823837 24.566958	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 12.194459 5.538920 27.208396	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 13.614732 6.598471 26.941082	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 12.080759 7.302812 27.559544	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 12.329165 4.787562 24.860887	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 12.250136 6.001267 23.538831	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 13.728776 5.863991 24.542685	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 9.919749 10.832478 24.489132	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 11.048733 11.724273 25.563552	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 11.356464 11.657671 23.796962	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 13.749867 9.190232 25.184066	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 13.613823 10.665772 24.167225	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 13.339599 10.780678 25.937954	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 9.035131 6.833374 27.861631	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 7.748643 7.729493 26.982978	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 8.805402 6.574939 26.106825	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 10.205195 8.893043 28.635720	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.937843 1.029025 21.107592
H 10.611488 10.158257 27.429754	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774192 0.546629 21.846685
H 8.900372 9.886179 27.913641	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533715 0.564199 21.840752
reaction-3-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363716 1.022462 21.100333
132	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861291 3.262293 21.828241
65.544134	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686653 2.780516 21.120234
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601387 2.800102 21.107106
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.450831 3.260784 21.809187
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881312 8.174961 21.861489
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.704952 8.237439 21.721515
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.654053 8.302496 21.649298
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.420329 8.195766 21.840408
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825727 10.419796 21.150569
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.758528 10.834331 21.583829
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.528755 10.737026 21.766028
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.299007 10.416352 21.075541
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.555001 7.630071 23.288065
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.736362 6.982382 23.306622
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.677472 9.338216 25.091151
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.705851 7.793459 23.353194
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 4.746088 7.648994 23.721626
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.814522 11.603879 23.145575
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 5.062373 11.462492 23.825902

H 6.721451 11.692277 23.613292	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Ti 10.067753 7.762958 25.114586	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 8.254366 8.073583 26.249835	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 7.278170 7.287627 25.918747	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 8.120966 8.924824 27.447096	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 11.238809 9.211579 25.528635	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
C 12.574734 9.220972 26.117629	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
C 10.719852 10.552966 25.258213	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
N 10.923537 6.164216 25.702337	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
C 10.983647 6.005113 27.155611	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
C 11.510348 5.044234 24.969520	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 10.406631 5.113837 27.493144	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 12.032670 5.885736 27.508443	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 10.561669 6.895380 27.671896	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 10.996263 4.086184 25.207973	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 11.440869 5.220549 23.882331	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 12.584978 4.921221 25.228613	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 9.740580 10.505161 24.737766	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 10.582296 11.127750 26.203802	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 11.391760 11.146542 24.600060	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 12.920648 8.188887 26.298441	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 13.302741 9.710441 25.431192	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 12.588010 9.782533 27.080899	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 6.402406 7.034255 26.539426	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 5.522139 9.359251 25.834905	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 7.341311 6.705657 24.988195	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 7.810204 8.331693 28.329539	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938314 1.025917 21.111239
H 9.083069 9.417206 27.659159	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773982 0.546064 21.844964
H 7.358308 9.704377 27.257804	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533904 0.564710 21.836294
reaction-3-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364057 1.015850 21.106852
132	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861254 3.261126 21.824662
24.935955	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.685848 2.783413 21.126529
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.602240 2.803678 21.115624
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449347 3.256707 21.798703
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.877447 8.173692 21.858855
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.693341 8.296432 21.657469
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.658309 8.235087 21.671679
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.423867 8.203838 21.817713
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.827845 10.423855 21.155406
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.765658 10.819660 21.599261
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.532070 10.672219 21.716592
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.302504 10.426360 21.080173
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.511798 7.438870 23.204260

H 9.060430 6.519633 23.005135	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
H 3.376871 9.928564 24.639075	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
N 5.386660 7.655884 23.256936	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
H 4.379615 7.581341 23.451024	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
N 5.820133 11.603826 23.158746	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
H 5.072065 11.455565 23.842158	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
H 6.726158 11.700421 23.630812	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Ti 8.976490 7.692164 25.071655	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
N 7.033098 7.846229 25.145473	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
C 6.208131 6.997692 24.288167	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 6.265937 8.678705 26.070688	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
N 9.723678 9.209691 25.995120	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
C 10.606928 9.235080 27.156855	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
C 9.325405 10.551298 25.574144	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 9.521347 6.115477 26.040127	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
C 8.777765 5.474163 27.122231	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
C 10.746864 5.389123 25.705140	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 8.491544 4.428703 26.861812	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 9.388128 5.422946 28.054181	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 7.855216 6.038635 27.346512	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 10.527122 4.342058 25.390570	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 11.286260 5.890768 24.880516	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 11.433829 5.330659 26.581198	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 8.726728 10.511278 24.641349	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 8.711638 11.063576 26.356081	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 10.211069 11.196795 25.371916	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 10.880397 8.206408 27.450759	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 11.543084 9.800454 26.941859	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 10.118920 9.731063 28.029337	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 5.495492 6.420274 24.924679	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 3.516282 9.231202 24.875778	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 6.874225 6.251739 23.801560	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 5.542267 8.064857 26.657062	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 6.943513 9.176023 26.785631	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938664 1.025474 21.108036
H 5.682539 9.464260 25.544762	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774305 0.546243 21.845583
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533699 0.562880 21.839077
reaction-4-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364182 1.015037 21.101554
132	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861340 3.259193 21.820771
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687068 2.786426 21.131003
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600931 2.802451 21.112522
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449834 3.252001 21.796150
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879247 8.187844 21.859493
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.681409 8.312801 21.598117

Si 9.663761 8.118000 21.745479	132	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 13.422150 8.201213 21.815513	88.971580	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 1.830600 10.431924 21.165120	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 5.755022 10.804306 21.580634	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 9.528369 10.514130 21.499179	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 13.304443 10.409310 21.060200	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 9.690662 7.647118 23.411061	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
H 8.913028 7.006309 23.645438	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
H 6.175176 8.032508 23.955041	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 5.550031 7.670425 23.225268	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
H 4.592657 7.604971 23.597148	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
N 5.790340 11.544344 23.162589	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
H 4.999953 11.441689 23.805670	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
H 6.674144 11.618843 23.674300	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Ti 10.794264 8.174893 25.006312	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 9.745396 8.416169 26.608835	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 8.791698 7.348104 26.903258	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 9.869325 9.383364 27.689195	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 11.769754 9.839437 24.842966	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
C 13.182660 10.126400 25.047053	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
C 10.990581 11.063289 24.667410	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
N 12.069454 6.812316 25.495611	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
C 12.503646 6.554191 26.867120	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
C 12.615788 5.823837 24.566958	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 12.194459 5.538920 27.208396	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 13.614732 6.598471 26.941082	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 12.080759 7.302812 27.559544	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 12.329165 4.787562 24.860887	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 12.250136 6.001267 23.538831	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 13.728776 5.863991 24.542685	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 9.919749 10.832478 24.489132	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 11.048733 11.724273 25.563552	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 11.356464 11.657671 23.796962	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 13.749867 9.190232 25.184066	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 13.613823 10.665772 24.167225	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 13.339599 10.780678 25.937954	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 9.035131 6.833374 27.861631	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 7.748643 7.729493 26.982978	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 8.805402 6.574939 26.106825	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 10.205195 8.893043 28.635720	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938078 1.026777 21.108675
H 10.611488 10.158257 27.429754	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774015 0.546075 21.846517
H 8.900372 9.886179 27.913641	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533925 0.563656 21.839410
reaction-4-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364323 1.022251 21.103032

Si 1.861470 3.260759 21.824475	H 4.934832 6.117625 24.941188	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 5.686223 2.780730 21.121157	H 6.624959 5.489299 24.535703	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 9.601680 2.801081 21.110408	H 6.638868 7.730247 27.638607	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 13.449480 3.261783 21.807143	H 7.454722 9.289761 27.354675	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 1.884202 8.175197 21.859990	H 5.768798 9.037201 26.780653	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 5.733808 8.251380 21.714608	reaction-4-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 9.642457 8.221443 21.658006	132	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 13.422879 8.191653 21.836762	6.025231	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 1.828910 10.423017 21.153612	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 5.757106 10.807681 21.598759	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 9.533325 10.642109 21.663870	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 13.302690 10.410725 21.078578	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 9.319574 7.566418 23.247635	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
H 8.626874 6.795216 23.141942	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
H 6.601441 8.228813 24.846615	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 5.519100 7.428609 23.203533	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
H 4.513609 7.446154 23.452044	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
N 5.782207 11.592860 23.158573	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
H 4.994997 11.496472 23.806997	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
H 6.668361 11.677035 23.666103	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Ti 9.243038 7.843954 25.145225	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 7.278597 8.052441 25.621992	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 6.006399 6.156381 25.143336	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 6.758410 8.554232 26.896793	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 10.146371 9.435684 25.740516	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
C 11.260421 9.570822 26.675861	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
C 9.633410 10.729545 25.298820	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
N 10.099338 6.369761 26.020215	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
C 9.730717 6.077967 27.405074	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
C 11.068679 5.420297 25.477750	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 9.263952 5.071807 27.504109	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 10.620284 6.102100 28.076737	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 9.005578 6.822319 27.789303	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 10.676146 4.378296 25.501587	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 11.316306 5.678938 24.432841	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 12.010080 5.433843 26.069097	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 8.835245 10.594071 24.541756	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 9.208017 11.318040 26.145545	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 10.432687 11.344945 24.826156	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 11.620210 8.575599 26.989609	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 12.112177 10.117265 26.209792	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 10.962597 10.142483 27.584468	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 6.255147 6.181210 26.208794	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440

Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 11.314887 10.556656 26.678552	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 12.353191 10.298920 25.231619	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 1.938254 1.024302 21.114335	H 12.399200 7.009132 26.998687	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 5.774352 0.544476 21.846334	H 13.453333 8.342918 26.404076	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 9.533651 0.566014 21.835175	H 12.401364 8.603428 27.833730	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 13.363741 1.018784 21.105539	H 5.827411 6.725468 25.003001	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 1.861403 3.260836 21.824527	H 4.289902 6.537765 24.080290	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 5.686348 2.781987 21.125210	H 5.828389 5.943763 23.386135	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 9.601931 2.806725 21.118076	H 7.287813 8.326377 27.733845	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 13.449326 3.259297 21.801295	H 8.885769 9.123865 27.717444	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 1.881766 8.180969 21.864972	H 7.463321 9.969626 27.040412	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 5.700346 8.378665 21.634758	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 9.663943 8.184671 21.700022	reaction-5-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 13.422251 8.196248 21.825626	132	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 1.827142 10.422749 21.156877	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 5.751083 10.856386 21.589011	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 9.530611 10.637744 21.684774	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 13.302831 10.418041 21.079465	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
N 9.622016 7.435464 23.255910	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
H 8.835218 6.753866 23.255718	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
H 7.561121 8.601252 25.115252	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
N 5.630198 8.070621 23.370009	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
H 5.053873 8.795650 23.821722	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
N 5.768268 11.618724 23.157632	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
H 4.941881 11.629353 23.761140	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
H 6.632171 11.642557 23.706392	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Ti 9.892512 7.549114 25.212247	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
N 8.275071 8.395248 25.824260	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
C 5.375754 6.755543 23.989429	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 7.959803 8.978234 27.128621	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
N 11.373592 8.540171 25.963605	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
C 12.454302 8.101631 26.838890	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
C 11.402569 9.983799 25.726785	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 10.007062 5.776529 25.953447	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
C 9.297810 5.206711 27.092968	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
C 10.909935 4.829292 25.302730	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 8.670897 4.333097 26.793296	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 10.007778 4.847022 27.873150	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 8.634775 5.962179 27.550080	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 10.364131 3.928466 24.930092	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 11.414431 5.299964 24.435503	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 11.701224 4.470625 26.001478	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 10.567948 10.290396 25.069792	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320

Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 12.194459 5.538920 27.208396	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 13.614732 6.598471 26.941082	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 12.080759 7.302812 27.559544	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 12.329165 4.787562 24.860887	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.250136 6.001267 23.538831	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.728776 5.863991 24.542685	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 9.919749 10.832478 24.489132	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 11.048733 11.724273 25.563552	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 11.356464 11.657671 23.796962	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 1.938664 1.025474 21.108036	H 13.749867 9.190232 25.184066	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 5.774305 0.546243 21.845583	H 13.613823 10.665772 24.167225	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 9.533699 0.562880 21.839077	H 13.339599 10.780678 25.937954	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 13.364182 1.015037 21.101554	H 9.035131 6.833374 27.861631	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 1.861340 3.259193 21.820771	H 7.748643 7.729493 26.982978	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 5.687068 2.786426 21.131003	H 8.805402 6.574939 26.106825	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 9.600931 2.802451 21.112522	H 10.205195 8.893043 28.635720	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 13.449834 3.252001 21.796150	H 10.611488 10.158257 27.429754	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 1.879247 8.187844 21.859493	H 8.900372 9.886179 27.913641	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 5.681409 8.312801 21.598117	reaction-5-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 9.663761 8.118000 21.745479	132	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 13.422150 8.201213 21.815513	90.641921	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 1.830600 10.431924 21.165120	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 5.755022 10.804306 21.580634	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 9.528369 10.514130 21.499179	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 13.304443 10.409310 21.060200	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 9.690662 7.647118 23.411061	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
H 8.913028 7.006309 23.645438	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
H 6.175176 8.032508 23.955041	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 5.550031 7.670425 23.225268	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
H 4.592657 7.604971 23.597148	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
N 5.790340 11.544344 23.162589	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
H 4.999953 11.441689 23.805670	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
H 6.674144 11.618843 23.674300	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Ti 10.794264 8.174893 25.006312	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 9.745396 8.416169 26.608835	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 8.791698 7.348104 26.903258	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 9.869325 9.383364 27.689195	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 11.769754 9.839437 24.842966	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
C 13.182660 10.126400 25.047053	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
C 10.990581 11.063289 24.667410	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
N 12.069454 6.812316 25.495611	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
C 12.503646 6.554191 26.867120	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
C 12.615788 5.823837 24.566958	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210

Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 11.321729 9.001874 25.695443	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 12.614535 8.975612 26.366479	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 10.841186 10.360738 25.437722	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 10.988621 5.966509 25.739019	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 10.875128 5.414905 27.088029	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 11.741174 5.100923 24.826900	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 10.360935 4.425777 27.082516	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 11.879958 5.265704 27.546099	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 10.302240 6.097840 27.746143	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 11.270275 4.095503 24.733285	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 11.797002 5.552523 23.820450	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 12.782376 4.947398 25.191362	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 9.886906 10.343960 24.871099	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 10.672369 10.918348 26.388606	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 11.572894 10.938823 24.829829	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 1.938235 1.028415 21.106456	H 12.936235 7.932751 26.527275	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 5.774258 0.546358 21.846037	H 13.389930 9.490354 25.755689	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 9.533793 0.564003 21.840011	H 12.569213 9.493662 27.351458	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 13.363907 1.018622 21.099026	H 6.708514 6.495695 26.523569	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 1.861442 3.260944 21.825029	H 5.967310 7.623020 25.095063	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 5.686495 2.781146 21.120931	H 7.654362 6.268755 25.004765	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 9.601541 2.800496 21.107655	H 7.833543 8.005240 28.285970	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 13.450584 3.255222 21.802615	H 8.956453 9.263394 27.660956	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 1.882385 8.180487 21.860336	H 7.219881 9.309481 27.209589	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 5.684514 8.265450 21.670933	reaction-5-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 9.671465 8.200227 21.699194	132	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 13.423487 8.192213 21.836398	2.810384	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 1.829814 10.427141 21.154555	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 5.760755 10.807795 21.579860	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 9.531611 10.638800 21.677996	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 13.301973 10.410968 21.073266	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 9.565353 7.556194 23.336606	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
H 8.715470 6.959205 23.339187	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
H 6.668139 7.749681 24.711117	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 5.504121 7.638402 23.250087	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
H 4.495527 7.624223 23.508019	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
N 5.816034 11.564750 23.151337	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
H 5.044093 11.449622 23.814547	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
H 6.714414 11.648823 23.637038	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Ti 10.126362 7.592939 25.204536	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 8.390730 7.820429 26.227434	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 7.381021 6.995228 25.795363	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 8.084109 8.635462 27.405258	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500

Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 5.090111 11.440927 23.845763	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.751922 11.657123 23.625809	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 10.578888 7.733371 25.099197	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 9.072633 8.184320 26.213768	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 7.985189 7.259171 25.910064	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 8.727603 9.246745 27.147987	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 11.863891 9.158310 25.241534	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 13.230348 9.164473 25.755280	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 11.407922 10.488032 24.846691	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 11.426528 6.138220 25.769422	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 11.379692 5.619994 27.134030	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 12.126581 5.244105 24.844844	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 10.884574 4.622669 27.180314	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 12.406120 5.493255 27.549981	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 10.824587 6.314993 27.790682	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 11.640397 4.242906 24.790533	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.139399 5.671044 23.822625	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.184741 5.082623 25.156839	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 10.387166 10.444676 24.408666	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 11.375646 11.188073 25.715043	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 12.078437 10.940033 24.077092	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 1.938530 1.026362 21.108932	H 13.535029 8.140654 26.037993	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 5.774417 0.546678 21.844398	H 13.947205 9.543906 24.986267	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 9.533525 0.564450 21.837084	H 13.322137 9.822183 26.650313	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 13.363921 1.012943 21.101852	H 7.398116 6.956773 26.803073	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 1.861297 3.260158 21.822998	H 5.677593 8.005415 24.124047	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 5.686779 2.785487 21.127834	H 8.390720 6.311777 25.488423	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 9.601479 2.804293 21.114519	H 8.466009 8.840140 28.153331	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 13.450337 3.250157 21.792638	H 9.583538 9.935649 27.270704	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 1.876229 8.178744 21.864021	H 7.852206 9.844021 26.799809	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 5.663194 8.330435 21.632630	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 9.674576 8.148700 21.713363	reaction-6-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 13.421720 8.195195 21.827044	132	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 1.827131 10.416878 21.140335	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 5.763716 10.820796 21.585241	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 9.527512 10.604034 21.640605	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 13.303561 10.415529 21.076551	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
N 9.736334 7.464098 23.298393	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
H 8.884843 6.897070 23.454603	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
H 7.297943 7.649182 25.119497	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
N 5.273848 7.716730 23.227810	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
H 4.257912 7.600241 23.348017	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
N 5.842370 11.565468 23.162877	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500

Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.304443 10.409310 21.060200	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.690662 7.647118 23.411061	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 8.913028 7.006309 23.645438	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 6.175176 8.032508 23.955041	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.550031 7.670425 23.225268	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 4.592657 7.604971 23.597148	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.790340 11.544344 23.162589	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.999953 11.441689 23.805670	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.674144 11.618843 23.674300	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 10.794264 8.174893 25.006312	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 9.745396 8.416169 26.608835	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 8.791698 7.348104 26.903258	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 9.869325 9.383364 27.689195	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 11.769754 9.839437 24.842966	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 13.182660 10.126400 25.047053	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 10.990581 11.063289 24.667410	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 12.069454 6.812316 25.495611	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 12.503646 6.554191 26.867120	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 12.615788 5.823837 24.566958	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 12.194459 5.538920 27.208396	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 13.614732 6.598471 26.941082	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 12.080759 7.302812 27.559544	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 12.329165 4.787562 24.860887	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.250136 6.001267 23.538831	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 13.728776 5.863991 24.542685	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 9.919749 10.832478 24.489132	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 11.048733 11.724273 25.563552	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 11.356464 11.657671 23.796962	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 1.938664 1.025474 21.108036	H 13.749867 9.190232 25.184066	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 5.774305 0.546243 21.845583	H 13.613823 10.665772 24.167225	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 9.533699 0.562880 21.839077	H 13.339599 10.780678 25.937954	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 13.364182 1.015037 21.101554	H 9.035131 6.833374 27.861631	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 1.861340 3.259193 21.820771	H 7.748643 7.729493 26.982978	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 5.687068 2.786426 21.131003	H 8.805402 6.574939 26.106825	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 9.600931 2.802451 21.112522	H 10.205195 8.893043 28.635720	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 13.449834 3.252001 21.796150	H 10.611488 10.158257 27.429754	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 1.879247 8.187844 21.859493	H 8.900372 9.886179 27.913641	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 5.681409 8.312801 21.598117	reaction-6-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 9.663761 8.118000 21.745479	132	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 13.422150 8.201213 21.815513	94.695894	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 1.830600 10.431924 21.165120	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 5.755022 10.804306 21.580634	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 9.528369 10.514130 21.499179	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000

Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.721336 8.303624 21.652927	reaction-6-product
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.649395 8.259149 21.727542	132
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.417322 8.197414 21.832411	47.157642
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.826762 10.437638 21.168635	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.754067 10.823337 21.594813	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.530761 10.685462 21.707428	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.299474 10.417967 21.082378	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.614367 7.693756 23.343884	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.167255 6.762478 23.402276	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 6.067710 7.007317 23.954108	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.404273 7.412302 23.094905	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 4.479834 7.595385 23.518167	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.792976 11.578250 23.170417	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 5.010918 11.445906 23.819130	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.682678 11.565636 23.684316	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 9.808951 8.237659 25.279985	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 8.188864 8.665322 25.936362	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 6.509389 5.841935 24.972171	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 6.992483 9.212707 26.471094	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 10.891084 9.806706 25.908177	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 11.914779 9.763214 26.942234	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 10.596637 11.165307 25.484075	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 10.384075 6.681486 26.254555	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 9.764080 6.026719 27.402136	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 11.531621 5.943639 25.727379	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.372889 5.016605 27.136363	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 10.495671 5.881476 28.231978	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 8.931212 6.649439 27.774481	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 11.264941 4.890129 25.477453	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 11.905238 6.407579 24.791467	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 12.382570 5.910225 26.448239	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 9.849091 11.171681 24.661637	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 10.182305 11.777580 26.319048	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 11.510736 11.689456 25.119795	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 1.938415 1.025357 21.111527	H 12.096171 8.722964 27.264123	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 5.773805 0.546301 21.843349	H 12.878576 10.192909 26.574129	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 9.534162 0.564603 21.835240	H 11.619848 10.368878 27.831093	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 13.364059 1.018234 21.107565	H 6.759552 6.085906 26.013894	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 1.861729 3.260739 21.822253	H 5.525569 5.376107 24.808387	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 5.686580 2.783056 21.124495	H 7.333525 5.351543 24.435977	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 9.601167 2.803204 21.112642	H 6.555061 8.597627 27.293372	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 13.449491 3.259542 21.801058	H 7.177650 10.231886 26.894401	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 1.885778 8.191112 21.861645	H 6.201321 9.349202 25.695002	Si 13.438560 5.759380 17.715000

Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363557 1.017408 21.110180	H 7.011494 5.105066 25.983916
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861072 3.261748 21.826941	H 5.801080 4.081701 25.119034
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686392 2.789362 21.128547	H 7.520262 4.094299 24.585883
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601401 2.810384 21.122968	H 6.642031 7.763968 27.420933
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449954 3.260308 21.803815	H 6.632253 9.495122 26.939005
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.838006 8.187289 21.845140	H 5.988934 8.264232 25.820038
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.961012 8.711241 21.519731	*****
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.664694 8.348621 21.756005	reaction-7-reactant
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.422010 8.233624 21.757695	122
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.814211 10.442090 21.178841	0.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.779238 11.104722 21.637564	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.525315 10.774564 21.809150	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.295666 10.458946 21.093659	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.810177 7.716984 23.350003	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.023276 6.702485 23.314223	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 6.488501 5.546153 24.320585	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 4.743701 7.578315 21.921958	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 3.839590 9.598970 19.072500	H 4.130927 7.746961 22.742874	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 7.679180 9.598970 19.072500	N 5.762437 11.900620 23.176035	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 4.944816 11.835928 23.789488	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.629065 11.958239 23.722431	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 3.839590 13.438560 19.072500	Ti 9.756004 8.206454 25.337062	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 7.679180 13.438560 19.072500	N 8.089913 8.320162 25.979894	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 6.702126 4.705730 25.003135	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	C 6.802520 8.456770 26.561378	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 3.928690 0.007500 20.482220	N 10.505929 9.949506 25.995970	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 11.474590 10.109888 27.069504	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	C 9.871280 11.204792 25.633126	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	N 10.624632 6.825629 26.362804	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	C 10.207003 6.028528 27.507608	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	C 11.984052 6.514069 25.920780	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 10.229158 4.936312 27.280662	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 10.880693 6.190376 28.382928	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 9.180557 6.305664 27.801949	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 12.092115 5.445547 25.616724	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 12.269970 7.135064 25.043435	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 12.738899 6.707010 26.721599	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 9.146466 11.050712 24.809907	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 9.326658 11.649286 26.501553	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 10.616878 11.961104 25.291213	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 1.937644 1.028978 21.105946	H 11.923683 9.138305 27.336449	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 5.774749 0.550516 21.845047	H 12.289713 10.814507 26.778386	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 9.533762 0.566951 21.833662	H 10.996748 10.538122 27.982993	Si 1.919790 1.919790 17.715000

Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 7.929580 6.189896 27.152906
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.824709 7.639256 27.727130
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 7.046575 7.555462 27.924122
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-7-TS
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938470 1.022443 21.111411	122
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773383 0.543784 21.850864	35.377890
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534017 0.564082 21.837408	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364334 1.019541 21.102947	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861352 3.258432 21.820696	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687190 2.788237 21.138231	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600478 2.804110 21.114948	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449357 3.257891 21.800364	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879483 8.189302 21.847885	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.720143 8.290880 21.668010	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.635323 8.131522 21.728218	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.421682 8.189601 21.834939	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.830691 10.429795 21.150688	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.768992 10.776404 21.588599	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.530541 10.558537 21.559066	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.304205 10.408100 21.075411	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.403985 7.600548 23.354865	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.190389 7.770614 23.999841	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.943436 7.770644 23.322918	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 5.158073 7.981000 23.960866	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.941885 11.338685 23.240672	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 5.161269 11.167899 23.886247	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 6.283125 12.297605 23.375397	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.634251 7.153037 24.161892	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 7.710169 7.897071 25.926686	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	C 7.884748 7.289375 27.239071	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 7.644810 9.359834 25.984169	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.564614 5.273019 24.550419	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.313066 4.547048 24.754448	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.739609 4.429460 24.756566	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.249536 3.661712 24.077286	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.234430 4.167200 25.799431	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.445185 5.198471 24.547494	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.728276 3.550029 24.066690	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.668203 4.998897 24.571743	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.773441 4.026889 25.794598	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 7.479857 9.796416 24.978327	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 6.799570 9.692064 26.631872	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.581169 9.795428 26.403440	Si 1.919790 5.759380 17.715000

Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938057 1.026180 21.110197	122
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773791 0.551749 21.844254	29.872635
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534389 0.565239 21.837058	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363626 1.018564 21.105319	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861003 3.261053 21.825342	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686982 2.793322 21.136286	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600725 2.805143 21.117590	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449598 3.258937 21.801021	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.882191 8.176980 21.879957	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.682379 8.193518 21.523749	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.557517 8.361473 21.749434	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424146 8.200239 21.823757	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825236 10.415244 21.135984	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.889398 10.579351 21.655246	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.532630 10.767867 21.720048	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.298488 10.434619 21.094129	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.010965 8.131122 23.414567	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.752710 8.061482 24.134341	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.800895 7.756965 23.221353	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.888254 7.751786 23.713637	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.580635 10.545028 23.275884	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.073116 10.834321 25.559947	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 7.067357 11.424878 23.508008	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.227801 8.683501 24.110586	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 6.821275 10.840414 26.270828	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	C 6.191849 10.664636 27.589616	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 7.500008 12.155111 26.199626	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.248370 7.795842 25.816633	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.350049 6.804305 26.396381	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.395161 8.077898 26.675916	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.885155 5.844474 26.581596	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 5.941791 7.145150 27.375199	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.507706 6.592933 25.716088	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 9.052327 7.182559 26.769419	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.002300 8.912605 26.271575	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.078835 8.377445 27.700779	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 7.799151 12.380190 25.159430	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 6.863231 12.998678 26.556911	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.418529 12.136479 26.817710	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 5.646224 9.702381 27.616866	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 6.972207 10.640872 28.374185	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 5.479693 11.482724 27.846199	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-7-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000

Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861245 3.258842 21.821828	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687074 2.785825 21.127918	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600709 2.807153 21.114870	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449347 3.256681 21.797382	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881010 8.198076 21.864455	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.681438 8.179480 21.547795	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.564512 8.283649 21.761554	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.423386 8.190200 21.831824	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825312 10.437813 21.149638	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.882715 10.595354 21.666876	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.537607 10.660923 21.590403	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.300767 10.414190 21.076584	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.000168 8.147109 23.423739	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.731507 8.157291 24.156919	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.775184 7.720506 23.249245	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.854299 7.677423 23.727442	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.526660 10.544627 23.323336	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 5.849485 11.204161 25.917582	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 6.980244 11.423449 23.629050	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.186495 8.755804 24.050277	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 6.270685 11.767057 26.672682	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	C 5.379529 11.873510 27.827224	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 6.788404 13.058255 26.205837	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.258654 8.596940 25.944084	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.369792 7.868671 26.845762	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.375279 9.255573 26.625337	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.932722 7.092662 27.412362	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 5.898887 8.552305 27.586993	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.568350 7.359632 26.277507	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 9.002828 8.511673 27.166495	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.025469 9.778765 25.893351	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.003952 10.028850 27.330669	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 6.943958 13.048131 25.110152	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 6.096537 13.904547 26.432214	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 7.762945 13.290033 26.682650	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 4.882350 10.901772 28.007575	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 5.959284 12.129249 28.738121	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 4.583926 12.650677 27.712244	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 1.938277 1.022750 21.112592	reaction-8-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 5.773920 0.546856 21.846512	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 9.534026 0.568047 21.833768	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 13.363739 1.015663 21.108089	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000

Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449357 3.257891 21.800364	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879483 8.189302 21.847885	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.720143 8.290880 21.668010	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.635323 8.131522 21.728218	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.421682 8.189601 21.834939	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.830691 10.429795 21.150688	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.768992 10.776404 21.588599	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.530541 10.558537 21.559066	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.304205 10.408100 21.075411	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.403985 7.600548 23.354865	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 10.190389 7.770614 23.999841	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.943436 7.770644 23.322918	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 5.158073 7.981000 23.960866	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.941885 11.338685 23.240672	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 5.161269 11.167899 23.886247	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 6.283125 12.297605 23.375397	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.634251 7.153037 24.161892	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 7.710169 7.897071 25.926686	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	C 7.884748 7.289375 27.239071	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 7.644810 9.359834 25.984169	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.564614 5.273019 24.550419	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.313066 4.547048 24.754448	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.739609 4.429460 24.756566	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.249536 3.661712 24.077286	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.234430 4.167200 25.799431	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.445185 5.198471 24.547494	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.728276 3.550029 24.066690	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.668203 4.998897 24.571743	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.773441 4.026889 25.794598	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 7.479857 9.796416 24.978327	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 6.799570 9.692064 26.631872	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.581169 9.795428 26.403440	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 7.929580 6.189896 27.152906	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.824709 7.639256 27.727130	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 7.046575 7.555462 27.924122	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-8-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 1.938470 1.022443 21.111411	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 5.773383 0.543784 21.850864	65.100257	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 9.534017 0.564082 21.837408	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 13.364334 1.019541 21.102947	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 1.861352 3.258432 21.820696	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 5.687190 2.788237 21.138231	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 9.600478 2.804110 21.114948	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000

Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.423339 8.206913 21.822581	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.827245 10.416951 21.130395	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.886577 10.625879 21.656897	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.529166 10.785954 21.754053	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.297644 10.435565 21.081351	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.189891 8.076793 23.387783	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.856497 8.454376 24.089477	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.692838 7.797839 23.223483	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.791925 7.906577 23.721584	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.560865 10.548140 23.236940	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.424885 9.672271 24.830379	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 7.166530 11.373523 23.408473	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.399451 7.925393 24.120401	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 7.016008 9.442782 25.752736	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	C 6.513376 8.467376 26.773821	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 6.750155 10.796754 26.348880	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.525221 6.103987 24.757169	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.360153 5.270866 25.063274	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.767428 5.375068 25.029300	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.425394 4.299386 24.523661	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.305039 5.032608 26.151917	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.424196 5.768913 24.759873	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.773469 4.402773 24.484868	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.640864 5.964016 24.705207	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.870779 5.141390 26.114204	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 6.650087 11.549071 25.550013	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 5.805784 10.758430 26.928461	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 7.566641 11.084522 27.038363	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 6.753146 7.423791 26.504484	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 7.032242 8.689376 27.725551	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 5.420564 8.560251 26.948554	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-8-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 1.937791 1.023811 21.115007	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 5.773895 0.549752 21.845973	38.161023	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 9.534213 0.567044 21.836406	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 13.363838 1.017413 21.107737	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 1.860956 3.260859 21.827348	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 5.685572 2.786832 21.126412	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 9.601789 2.804004 21.113513	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 13.449783 3.258792 21.802294	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 1.883428 8.181310 21.878520	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 5.669167 8.235041 21.535610	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 9.601410 8.361092 21.699097	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500

Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.297767 10.435540 21.080945	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.161336 8.126632 23.392964	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.844898 8.521617 24.066079	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.672322 7.735019 23.177199	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.765581 7.896221 23.652997	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.676775 10.333911 23.236861	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.086381 9.821590 25.425950	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 7.333217 11.128019 23.385704	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.322389 8.198862 24.091715	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 6.911795 9.433201 25.929396	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	C 6.468205 8.750598 27.169957	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 7.769895 10.619851 26.237943	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.382182 6.520979 25.086283	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.274673 5.601471 25.336386	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.598480 6.036670 25.742427	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.558334 4.565418 25.041294	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.001408 5.555959 26.417845	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.385594 5.892325 24.752586	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.836425 5.001570 25.406936	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.465606 6.675021 25.498807	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.484609 5.997526 26.851111	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 7.886724 11.231149 25.330111	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 7.304854 11.238141 27.032555	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.765179 10.292105 26.589428	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 5.806735 7.904740 26.919526	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 7.351071 8.355425 27.704364	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 5.932494 9.453105 27.841563	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 1.937815 1.023958 21.114924	reaction-9-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 5.773787 0.549917 21.846196	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 9.534284 0.567124 21.836456	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 13.363514 1.017018 21.107772	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 1.861056 3.261148 21.827399	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 5.685943 2.788780 21.130464	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 9.601516 2.805105 21.115355	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 13.449813 3.258403 21.801675	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 1.883220 8.181756 21.880484	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 5.664218 8.197148 21.504322	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 9.591643 8.386027 21.707772	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 13.423014 8.205946 21.822833	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 1.827227 10.417765 21.129553	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 5.934335 10.557471 21.672306	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 9.535188 10.807580 21.759349	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500

Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.943436 7.770644 23.322918	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 5.158073 7.981000 23.960866	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 5.941885 11.338685 23.240672	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 5.161269 11.167899 23.886247	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 6.283125 12.297605 23.375397	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.634251 7.153037 24.161892	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 7.710169 7.897071 25.926686	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	C 7.884748 7.289375 27.239071	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 7.644810 9.359834 25.984169	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.564614 5.273019 24.550419	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.313066 4.547048 24.754448	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.739609 4.429460 24.756566	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.249536 3.661712 24.077286	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.234430 4.167200 25.799431	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.445185 5.198471 24.547494	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.728276 3.550029 24.066690	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.668203 4.998897 24.571743	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.773441 4.026889 25.794598	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 7.479857 9.796416 24.978327	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 6.799570 9.692064 26.631872	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.581169 9.795428 26.403440	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 7.929580 6.189896 27.152906	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.824709 7.639256 27.727130	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 7.046575 7.555462 27.924122	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-9-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 1.938470 1.022443 21.111411	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 5.773383 0.543784 21.850864	69.686781	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 9.534017 0.564082 21.837408	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 13.364334 1.019541 21.102947	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 1.861352 3.258432 21.820696	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 5.687190 2.788237 21.138231	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 9.600478 2.804110 21.114948	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 13.449357 3.257891 21.800364	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 1.879483 8.189302 21.847885	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 5.720143 8.290880 21.668010	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 9.635323 8.131522 21.728218	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 13.421682 8.189601 21.834939	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 1.830691 10.429795 21.150688	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 5.768992 10.776404 21.588599	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 9.530541 10.558537 21.559066	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 13.304205 10.408100 21.075411	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 9.403985 7.600548 23.354865	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 10.190389 7.770614 23.999841	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500

Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 5.971470 12.039357 23.610205	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.559700 7.647923 24.164157	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 7.281526 9.515300 25.257681	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	C 7.234424 9.391677 26.743654	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 8.188194 10.581258 24.828572	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.467935 6.307393 25.514212	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.273415 5.576983 25.944058	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.672215 5.855159 26.216805	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.381350 4.488610 25.741373	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.104728 5.699808 27.038029	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.377371 5.932153 25.406039	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.872642 4.780437 26.014516	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.561231 6.429826 25.895263	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.559849 5.977459 27.316902	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 9.250375 11.122692 23.179426	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 7.957760 11.555885 25.291262	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 9.248424 10.301924 24.955696	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 6.566310 8.557005 27.033701	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.248027 9.185184 27.130765	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 6.870909 10.336246 27.195398	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-9-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 1.937759 1.026261 21.108553	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 5.774935 0.545276 21.851573	-0.678128	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 9.533464 0.562965 21.840517	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 13.364157 1.019147 21.101747	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 1.861076 3.262646 21.828169	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 5.686684 2.781208 21.121603	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 9.600377 2.799060 21.110311	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 13.449234 3.259283 21.802467	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 1.883365 8.177219 21.880749	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 5.711656 8.301962 21.551504	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 9.621221 8.273453 21.704137	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 13.421359 8.208343 21.834774	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 1.829249 10.409916 21.145111	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 5.769979 10.730628 21.695464	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 9.506797 10.698615 21.737520	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 13.297946 10.446596 21.125219	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 9.332498 7.771151 23.377248	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 10.138842 7.871554 24.020027	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 5.903263 7.712214 23.206997	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 5.060604 7.817753 23.801868	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 5.969996 11.030456 23.370552	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 6.356938 9.860776 24.858652	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500

Si 11.518770 13.438560 19.072500	C 6.755815 10.959819 24.342539	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.459964 6.423120 25.527301	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.289293 5.660188 25.976170	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.686829 5.983337 26.196480	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.423464 4.575552 25.772195	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.130945 5.779046 27.070701	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.374761 5.989839 25.452342	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.878327 4.904881 26.000937	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.562025 6.551794 25.835771	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.608299 6.116239 27.301067	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 9.595902 11.292602 23.115784	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 6.634062 11.725010 25.137095	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 7.787552 11.028012 23.949658	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 7.182859 8.798637 26.990858	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.298421 10.061203 26.376561	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 6.695561 10.537934 27.022634	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 1.937858 1.026461 21.103458	reaction-10-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 5.775293 0.538666 21.861439	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 9.533709 0.561618 21.843892	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 13.364019 1.023424 21.094608	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 1.861380 3.261039 21.826652	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 5.687297 2.776475 21.123759	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 9.600610 2.796871 21.106563	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 13.449149 3.259849 21.804213	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 1.888582 8.171939 21.895084	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 5.697475 8.299249 21.529977	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 9.599954 8.327966 21.703147	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 13.422186 8.204996 21.837657	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 1.825855 10.396861 21.135821	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 5.764925 10.754244 21.606081	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 9.535882 10.732787 21.725044	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 13.297310 10.437641 21.117324	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 9.155209 7.954876 23.385478	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
H 9.886922 8.151802 24.096862	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
N 5.734477 7.604841 23.162158	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 4.806164 7.523295 23.619250	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
N 5.723320 11.151709 23.356899	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 5.660857 9.419292 25.147257	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.059562 11.883039 23.628011	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
Ti 7.376964 7.704042 24.114327	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
N 6.676492 9.603110 25.074939	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
C 7.237551 9.758961 26.449615	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220

Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.739609 4.429460 24.756566	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 6.249536 3.661712 24.077286	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.234430 4.167200 25.799431	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.445185 5.198471 24.547494	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.728276 3.550029 24.066690	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.668203 4.998897 24.571743	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.773441 4.026889 25.794598	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 7.479857 9.796416 24.978327	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 6.799570 9.692064 26.631872	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 8.581169 9.795428 26.403440	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 7.929580 6.189896 27.152906	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.824709 7.639256 27.727130	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 7.046575 7.555462 27.924122	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-10-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 1.938470 1.022443 21.111411	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 5.773383 0.543784 21.850864	77.001120	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 9.534017 0.564082 21.837408	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 13.364334 1.019541 21.102947	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 1.861352 3.258432 21.820696	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 5.687190 2.788237 21.138231	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 9.600478 2.804110 21.114948	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 13.449357 3.257891 21.800364	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 1.879483 8.189302 21.847885	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 5.720143 8.290880 21.668010	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 9.635323 8.131522 21.728218	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 13.421682 8.189601 21.834939	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 1.830691 10.429795 21.150688	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 5.768992 10.776404 21.588599	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 9.530541 10.558537 21.559066	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 13.304205 10.408100 21.075411	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 9.403985 7.600548 23.354865	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 10.190389 7.770614 23.999841	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 5.943436 7.770644 23.322918	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 5.158073 7.981000 23.960866	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 5.941885 11.338685 23.240672	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.161269 11.167899 23.886247	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 6.283125 12.297605 23.375397	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
Ti 7.634251 7.153037 24.161892	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 7.710169 7.897071 25.926686	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 7.884748 7.289375 27.239071	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
C 7.644810 9.359834 25.984169	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 7.564614 5.273019 24.550419	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 6.313066 4.547048 24.754448	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600

Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.887916 3.838738 24.169466	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.720768 5.365537 24.616906	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.906026 4.374704 25.879720	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	H 6.914653 10.318184 24.008674	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 6.074414 9.986388 26.235544	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 7.768918 10.401408 25.926923	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 7.550627 6.785377 27.170361	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.137993 8.410780 27.681141	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 6.378139 8.066279 27.657646	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-10-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 1.938356 1.021984 21.113485	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 5.774048 0.545771 21.849030	14.937885	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 9.533932 0.566076 21.835561	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 13.364180 1.017862 21.106122	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 1.861357 3.258510 21.821703	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 5.687461 2.790448 21.140559	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 9.600820 2.809319 21.122675	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 13.449424 3.257946 21.799872	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 1.881997 8.187154 21.858029	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 5.687025 8.260706 21.568841	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 9.620575 8.195771 21.722449	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 13.422509 8.192078 21.832790	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 1.827656 10.422560 21.145456	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 5.780080 10.708145 21.605019	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 9.532573 10.605475 21.583094	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 13.303507 10.411824 21.077492	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 9.319701 7.775445 23.367813	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 10.055894 8.038931 24.040868	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 5.798191 7.742007 23.209970	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 4.974752 7.915162 23.807998	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 6.123466 10.964481 23.379378	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.896633 10.343997 24.514777	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 6.317367 11.948081 23.644249	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
Ti 7.507257 7.343794 24.104021	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 7.263989 8.315263 25.734946	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 7.336988 7.869829 27.124588	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
C 6.949411 9.734282 25.567873	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 7.608854 5.487959 24.601520	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 6.414355 4.666983 24.818542	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
C 8.840319 4.738645 24.828197	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.415490 3.770388 24.150950	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 6.364934 4.291389 25.867621	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 5.495046 5.247067 24.610543	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410

Si 7.703400 7.681920 20.510900	H 5.953219 9.507875 26.821987	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	H 7.489551 10.183565 26.236624	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 7.625944 6.405938 27.009523	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.045861 7.980901 27.756064	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 6.333182 7.453530 27.695368	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 1.938321 1.022546 21.113440	reaction-11-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 5.774547 0.545675 21.849440	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 9.533650 0.565593 21.836034	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 13.363955 1.018055 21.106412	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 1.861271 3.258658 21.822681	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 5.687490 2.789811 21.139540	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 9.600680 2.808644 21.122383	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 13.449264 3.258068 21.801099	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 1.883245 8.176259 21.866219	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 5.691060 8.237657 21.586793	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 9.614586 8.195609 21.745431	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 13.423788 8.196014 21.828376	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 1.836418 10.419190 21.183232	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 5.767114 10.720654 21.570667	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 9.530034 10.618428 21.602186	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 13.302353 10.419495 21.083224	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 9.257163 7.759662 23.390017	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
H 9.972407 8.025908 24.085344	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
N 5.769503 7.620473 23.207666	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 4.907811 7.718429 23.769143	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
N 6.011538 11.114848 23.251783	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 5.965726 9.863112 25.208928	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 6.146534 12.101162 23.512582	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
Ti 7.465683 7.239483 24.113533	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
N 7.130553 8.085181 25.819370	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
C 7.292933 7.447834 27.129117	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 6.681800 9.472656 25.969864	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
N 7.687799 5.388708 24.576233	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
C 6.537734 4.516342 24.801615	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 8.952529 4.699899 24.793985	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 6.567737 3.624877 24.127417	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.517302 4.134241 25.851407	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 5.597517 5.052679 24.611862	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 9.038766 3.807152 24.138069	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 9.806735 5.372677 24.580563	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 9.035327 4.336628 25.840452	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 6.626754 10.525574 23.810652	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420

Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 8.824709 7.639256 27.727130	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 7.046575 7.555462 27.924122	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	reaction-11-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 1.938470 1.022443 21.111411	122	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 5.773383 0.543784 21.850864	81.583282	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 9.534017 0.564082 21.837408	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 13.364334 1.019541 21.102947	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 1.861352 3.258432 21.820696	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 5.687190 2.788237 21.138231	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 9.600478 2.804110 21.114948	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 13.449357 3.257891 21.800364	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 1.879483 8.189302 21.847885	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 5.720143 8.290880 21.668010	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 9.635323 8.131522 21.728218	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 13.421682 8.189601 21.834939	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 1.830691 10.429795 21.150688	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 5.768992 10.776404 21.588599	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 9.530541 10.558537 21.559066	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 13.304205 10.408100 21.075411	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 9.403985 7.600548 23.354865	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 10.190389 7.770614 23.999841	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 5.943436 7.770644 23.322918	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 5.158073 7.981000 23.960866	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 5.941885 11.338685 23.240672	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.161269 11.167899 23.886247	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 6.283125 12.297605 23.375397	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
Ti 7.634251 7.153037 24.161892	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 7.710169 7.897071 25.926686	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 7.884748 7.289375 27.239071	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
C 7.644810 9.359834 25.984169	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 7.564614 5.273019 24.550419	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 6.313066 4.547048 24.754448	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
C 8.739609 4.429460 24.756566	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.249536 3.661712 24.077286	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 6.234430 4.167200 25.799431	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 5.445185 5.198471 24.547494	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 8.728276 3.550029 24.066690	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 9.668203 4.998897 24.571743	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 8.773441 4.026889 25.794598	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 7.479857 9.796416 24.978327	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 6.799570 9.692064 26.631872	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 8.581169 9.795428 26.403440	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 7.929580 6.189896 27.152906	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938387 1.022567 21.108260

Si 5.774200 0.543478 21.851603	12.553087	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 9.533900 0.560316 21.841248	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 13.364749 1.019440 21.098759	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 1.861222 3.257436 21.818074	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 5.686811 2.782567 21.127845	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 9.600405 2.794026 21.098572	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 13.448851 3.256441 21.799740	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 1.882066 8.199017 21.844088	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 5.699427 8.253746 21.598605	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 9.628691 8.104854 21.736015	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 13.421361 8.188319 21.845067	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 1.829312 10.434155 21.152885	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 5.775108 10.712476 21.639065	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 9.532234 10.445549 21.354167	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 13.303038 10.402927 21.079712	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 9.293704 7.801827 23.402928	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 9.993892 8.150936 24.076603	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 5.815091 7.567540 23.194298	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 4.953762 7.623019 23.763044	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 6.023049 10.992129 23.363562	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.693123 10.059605 24.414768	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 5.930160 11.948032 23.744186	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
Ti 7.522839 7.267980 24.141136	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 7.201976 8.333950 25.717722	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 7.417904 7.979425 27.121379	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
C 6.636870 9.666848 25.548433	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 7.789834 5.487630 24.799906	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 6.631255 4.730094 25.279637	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
C 9.029826 4.718520 24.872129	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.494612 3.787685 24.702731	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 6.748358 4.452505 26.352855	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 5.703296 5.324547 25.180437	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 8.947363 3.772557 24.287263	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 9.872202 5.306574 24.470827	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 9.264613 4.431206 25.922950	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 6.679049 10.203279 24.236484	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 5.731252 9.801037 26.199367	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 7.334373 10.482483 25.865869	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 7.815656 6.951192 27.198704	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938357 1.023221 21.109267
H 8.143362 8.670780 27.608123	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774767 0.545898 21.850724
H 6.468126 8.038431 27.702458	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533555 0.561492 21.840337
reaction-11-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364578 1.020579 21.101442
122	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861130 3.258358 21.819659

Si 5.687251 2.785963 21.130903	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 9.600490 2.798355 21.106536	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 13.448959 3.258975 21.802069	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 1.880622 8.199395 21.843186	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 5.712820 8.223019 21.648935	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 9.624333 8.079832 21.737160	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 13.420906 8.185913 21.843512	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 1.829579 10.440553 21.173983	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 5.749639 10.761911 21.642341	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 9.529332 10.454544 21.397006	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 13.302676 10.401587 21.077696	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 9.326995 7.667889 23.391870	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
H 10.051745 7.976733 24.059834	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
N 5.891521 7.371143 23.172338	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 5.032950 7.314811 23.748589	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
N 5.854919 11.238216 23.312458	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 5.885635 9.237888 24.733061	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.791644 12.178538 23.703569	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
Ti 7.591313 7.037746 24.145503	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
N 7.245149 8.017940 25.770285	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
C 7.690321 7.725348 27.129680	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 6.492963 9.271591 25.668932	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
N 7.892370 5.261136 24.804638	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
C 6.752628 4.446864 25.228705	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 9.168485 4.572800 24.979662	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 6.675090 3.511081 24.628937	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.843755 4.153453 26.299859	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 5.804281 5.004274 25.107226	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 9.194578 3.620459 24.399288	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 10.002357 5.209054 24.636257	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 9.339158 4.307830 26.048885	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 6.269034 10.532395 23.925241	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 5.764685 9.373619 26.507304	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 7.152257 10.169959 25.694322	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 8.201544 6.746980 27.161485	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 8.399642 8.498256 27.506999	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938470 1.022443 21.111411
H 6.829944 7.697779 27.837965	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773383 0.543784 21.850864
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534017 0.564082 21.837408
reaction-12-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364334 1.019541 21.102947
122	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861352 3.258432 21.820696
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687190 2.788237 21.138231
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600478 2.804110 21.114948
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449357 3.257891 21.800364

Si 1.879483 8.189302 21.847885	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 5.720143 8.290880 21.668010	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 9.635323 8.131522 21.728218	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 13.421682 8.189601 21.834939	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 1.830691 10.429795 21.150688	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 5.768992 10.776404 21.588599	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 9.530541 10.558537 21.559066	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 13.304205 10.408100 21.075411	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 9.403985 7.600548 23.354865	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 10.190389 7.770614 23.999841	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 5.943436 7.770644 23.322918	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 5.158073 7.981000 23.960866	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 5.941885 11.338685 23.240672	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.161269 11.167899 23.886247	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 6.283125 12.297605 23.375397	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
Ti 7.634251 7.153037 24.161892	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 7.710169 7.897071 25.926686	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 7.884748 7.289375 27.239071	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
C 7.644810 9.359834 25.984169	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 7.564614 5.273019 24.550419	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 6.313066 4.547048 24.754448	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
C 8.739609 4.429460 24.756566	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.249536 3.661712 24.077286	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 6.234430 4.167200 25.799431	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 5.445185 5.198471 24.547494	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 8.728276 3.550029 24.066690	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 9.668203 4.998897 24.571743	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 8.773441 4.026889 25.794598	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 7.479857 9.796416 24.978327	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 6.799570 9.692064 26.631872	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 8.581169 9.795428 26.403440	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 7.929580 6.189896 27.152906	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938539 1.019492 21.113321
H 8.824709 7.639256 27.727130	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773467 0.547372 21.846514
H 7.046575 7.555462 27.924122	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534072 0.564950 21.836687
reaction-12-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364329 1.017124 21.104750
122	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861251 3.256599 21.816214
93.410133	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686539 2.788619 21.133849
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600878 2.804861 21.115169
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449163 3.256931 21.797673
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880466 8.195785 21.846736
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.692931 8.239172 21.616343
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.633510 8.098524 21.751831
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.421443 8.188076 21.835528

Si 1.828847 10.432967 21.150839	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 5.799464 10.697129 21.597423	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 9.530517 10.505047 21.481359	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 13.303042 10.404288 21.074460	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 9.389774 7.638834 23.387081	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 10.155592 7.908022 24.025476	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
N 5.816614 7.640740 23.234981	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 4.993643 7.849344 23.824606	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 6.300096 11.038037 23.225337	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.864388 10.677683 24.113185	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 6.694220 11.966924 23.420423	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
Ti 7.544460 7.429110 24.209330	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 7.439893 8.347278 25.765000	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 7.428818 8.368675 27.189413	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
C 5.636671 10.732130 26.163912	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 7.584937 5.642960 25.037830	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 6.373630 4.958800 25.471254	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
C 8.795259 4.949557 25.455363	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.329708 3.924112 25.057960	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 6.335310 4.865234 26.583452	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 5.474028 5.502100 25.134174	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 8.807773 3.901333 25.074889	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 9.692890 5.467930 25.076339	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 8.864014 4.886867 26.567966	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 5.407390 11.779715 25.927545	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 4.816810 10.018794 26.295491	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 6.517302 10.565464 26.782769	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 7.752152 7.373907 27.581119	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938521 1.017434 21.114343
H 8.135687 9.119807 27.616765	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774232 0.548866 21.841528
H 6.419545 8.558525 27.624686	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534057 0.565104 21.835887
reaction-12-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364341 1.014455 21.103632
122	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861031 3.255448 21.813439
75.894454	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.685986 2.787084 21.125931
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600511 2.803217 21.113207
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449150 3.254355 21.793356
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880563 8.199401 21.837296
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.701635 8.215151 21.651772
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.641431 8.045738 21.758251
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.421783 8.186728 21.838880
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.833723 10.438306 21.154932
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.808322 10.690012 21.732804
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.529311 10.426935 21.365316
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.300329 10.406189 21.086280

N 9.386948 7.615949 23.395275	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
H 10.137695 7.907198 24.041761	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
N 5.800186 7.598258 23.261497	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 4.975962 7.835785 23.839267	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
N 6.067237 11.058654 23.337542	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 4.906323 11.603817 25.727674	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 6.444763 11.987385 23.582701	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
Ti 7.537795 7.424071 24.235338	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
N 7.391724 8.483240 25.651984	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
C 7.286884 9.109024 26.921690	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 4.755398 12.087490 26.712214	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
N 7.556042 5.696007 25.227788	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
C 6.344055 5.066776 25.725357	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
C 8.766027 5.047190 25.703697	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 6.288938 4.000782 25.401310	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.312958 5.069378 26.839341	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 5.449315 5.589806 25.348166	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 8.777534 3.968472 25.421070	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 9.660427 5.527911 25.275144	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 8.836193 5.088228 26.817586	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 4.551552 13.161118 26.564633	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 3.879581 11.629493 27.205749	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 5.646740 11.955175 27.346396	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 7.513250 8.376173 27.734927	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 8.016115 9.943208 27.038725	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938525 1.025564 21.106165
H 6.266924 9.506436 27.114064	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774382 0.546952 21.849386
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533789 0.566058 21.835807
reaction-S8-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363866 1.020655 21.101213
116	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861237 3.258778 21.822162
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687851 2.788847 21.134244
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600477 2.806003 21.115973
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449555 3.258926 21.800676
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881734 8.192186 21.863588
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.685315 8.182943 21.545335
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.564521 8.269487 21.765765
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.423859 8.194798 21.831978
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825323 10.433199 21.149695
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.879399 10.614097 21.692685
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.535967 10.642151 21.574683
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301338 10.414456 21.069672
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 8.990193 8.133616 23.424327
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.718352 8.153285 24.159463
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.804312 7.658835 23.220176

H 4.897465 7.479343 23.681783	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
N 6.453768 10.519838 23.354904	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 6.508212 11.355704 23.983677	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
N 6.378996 12.688355 25.689659	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 6.789160 12.248750 26.527015	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 6.851993 13.597425 25.582833	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 5.402176 12.907000 25.934464	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
Ti 7.170044 8.768271 24.029628	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
N 7.141680 8.810463 25.943591	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
C 5.873602 8.691607 26.661700	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
C 8.291483 8.973850 26.828585	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 5.856706 7.785570 27.308458	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 5.692235 9.577050 27.313547	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 5.026300 8.621024 25.953144	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 8.432886 8.085341 27.484958	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938030 1.026412 21.110184
H 9.220749 9.118930 26.245634	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774086 0.547895 21.849027
H 8.167423 9.861873 27.490603	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533961 0.565557 21.838268
reaction-S8-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363425 1.018649 21.106557
116	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861086 3.261113 21.826954
20.002664	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687261 2.790745 21.136630
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600781 2.807221 21.120237
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449676 3.258845 21.802709
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.882408 8.177324 21.878816
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.678762 8.154466 21.542425
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.558865 8.354829 21.747237
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424443 8.199467 21.825908
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.823434 10.420104 21.147811
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.879988 10.594022 21.621227
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.529621 10.766253 21.715174
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.297039 10.429459 21.083447
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 8.964272 8.162754 23.399596
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.686625 8.140932 24.139915
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.792441 7.697331 23.230781
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.882440 7.551454 23.697383
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.578257 10.470292 23.214902
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.849670 11.504379 24.412257
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 6.906892 11.836498 25.468474
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 7.116436 10.642348 25.873255
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 7.632827 12.544327 25.629241
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 6.006013 12.214962 25.786542
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.162130 8.861856 23.989557
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.166459 9.279701 26.017319
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 5.893681 9.068112 26.738510

C 8.339141 9.023317 26.877387	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 5.827254 8.045678 27.166843	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 5.780049 9.798340 27.574358	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 5.033630 9.207533 26.049815	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 8.315684 8.001802 27.315182	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938078 1.026291 21.109810
H 9.273467 9.129414 26.294889	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774318 0.549791 21.846604
H 8.381419 9.749652 27.715673	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533901 0.567244 21.836050
reaction-S8-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363437 1.018913 21.106024
116	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861214 3.260888 21.827107
14.018428	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687314 2.789736 21.132037
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600923 2.807283 21.116892
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449763 3.259042 21.803354
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.883232 8.181079 21.876801
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.680290 8.156733 21.548811
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.558925 8.342869 21.753205
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424550 8.202822 21.825691
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.824088 10.422254 21.147192
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.886404 10.607039 21.611999
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.528049 10.748879 21.698981
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.297971 10.430642 21.081528
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 8.963486 8.158097 23.405434
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.686801 8.108174 24.144836
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.794612 7.703706 23.241466
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.884686 7.561449 23.707340
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.609155 10.445306 23.195171
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.985216 11.728063 24.728210
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 7.028413 11.973595 25.740167
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 7.248911 10.066649 26.245717
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 7.677609 12.761466 25.866075
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 6.094530 12.321239 26.002482
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.162746 8.887103 23.983629
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.198940 9.003487 26.181433
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 5.930114 8.604687 26.851073
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.388975 8.461461 26.884389
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 5.892285 7.505289 26.949709
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 5.851506 9.058605 27.856687
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.064676 8.935903 26.245089
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.316808 7.362761 26.947070
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.304583 8.726189 26.328976
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.466269 8.877455 27.910786
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	*****
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	reaction-S9-reactant
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	116

0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687851 2.788847 21.134244
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600477 2.806003 21.115973
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449555 3.258926 21.800676
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881734 8.192186 21.863588
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.685315 8.182943 21.545335
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.564521 8.269487 21.765765
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.423859 8.194798 21.831978
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825323 10.433199 21.149695
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.879399 10.614097 21.692685
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.535967 10.642151 21.574683
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301338 10.414456 21.069672
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 8.990193 8.133616 23.424327
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.718352 8.153285 24.159463
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.804312 7.658835 23.220176
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.897465 7.479343 23.681783
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.453768 10.519838 23.354904
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.508212 11.355704 23.983677
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 6.378996 12.688355 25.689659
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.789160 12.248750 26.527015
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.851993 13.597425 25.582833
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 5.402176 12.907000 25.934464
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.170044 8.768271 24.029628
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.141680 8.810463 25.943591
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 5.873602 8.691607 26.661700
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.291483 8.973850 26.828585
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 5.856706 7.785570 27.308458
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 5.692235 9.577050 27.313547
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.026300 8.621024 25.953144
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.432886 8.085341 27.484958
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.220749 9.118930 26.245634
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.167423 9.861873 27.490603
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	reaction-S9-TS
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	116
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	16.449163
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938525 1.025564 21.106165	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774382 0.546952 21.849386	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533789 0.566058 21.835807	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363866 1.020655 21.101213	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861237 3.258778 21.822162	Si 0.000000 7.679180 15.000000

Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.297113 10.429500 21.084994
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 8.996293 8.092502 23.393019
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.703965 7.948715 24.128872
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.815149 7.724398 23.260659
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.924171 7.564889 23.757596
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.605546 10.464670 23.200131
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.968197 11.334619 23.626790
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 7.586690 10.117968 25.767754
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 7.637323 8.917443 26.249134
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 8.381714 10.769129 25.695296
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 6.772579 10.662158 26.081788
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.261018 8.729113 24.089017
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.217074 7.706430 25.988137
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 5.901408 7.586547 26.634508
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.122717 6.631348 26.409317
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 5.418794 6.614972 26.387616
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 5.975518 7.662667 27.743690
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.221941 8.392613 26.295554
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 7.642236 5.633219 26.301710
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.037547 6.622500 25.789930
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.422206 6.749978 27.474592
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	reaction-S9-product
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	116
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	8.281639
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938052 1.023462 21.114559	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773859 0.550356 21.844434	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534249 0.567679 21.834578	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363488 1.016847 21.109795	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861011 3.260240 21.824820	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686847 2.791638 21.135716	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601023 2.808083 21.119161	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449745 3.258759 21.801818	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880985 8.179541 21.875270	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.681598 8.157281 21.565277	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.566964 8.342609 21.735591	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424239 8.198495 21.826061	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.823814 10.422556 21.148913	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.871957 10.571689 21.608850	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.532139 10.751666 21.706231	Si 9.598970 0.000000 16.357500

Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 6.554101 10.070285 26.330458
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.240558 8.736338 24.091278
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.354227 7.185592 26.078538
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.037357 6.854232 26.656239
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.356497 6.146930 26.374258
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 5.673565 5.902769 26.225748
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.069095 6.745121 27.764097
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.301868 7.642924 26.412870
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.021616 5.173310 25.963106
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.317735 6.403838 25.895758
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.522915 6.025519 27.467243
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	*****
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	reaction-S10-reactant
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	116
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	0.000000
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938246 1.024316 21.109480	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.773747 0.548753 21.845881	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534192 0.566973 21.835788	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363643 1.016278 21.105499	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.860956 3.258741 21.823266	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686841 2.790110 21.134971	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601030 2.806571 21.117258	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449743 3.256253 21.798607	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880737 8.181831 21.870889	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.676369 8.167914 21.558147	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.563941 8.337145 21.748961	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.424346 8.196958 21.826000	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.823365 10.424478 21.149374	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.871306 10.577681 21.585082	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.531423 10.745801 21.696346	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.297173 10.425417 21.078499	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.009114 8.120729 23.412263	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.729733 8.044024 24.149654	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.787448 7.736608 23.259050	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.876421 7.626880 23.734848	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.614225 10.450730 23.180163	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.932745 11.319888 23.640803	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 7.379399 9.808119 25.769864	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 7.673755 8.096815 26.482830	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 7.990407 10.635410 25.741870	Si 13.438560 7.679180 16.357500

Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.220749 9.118930 26.245634
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.167423 9.861873 27.490603
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	reaction-S10-TS
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	116
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	82.728667
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938525 1.025564 21.106165	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774382 0.546952 21.849386	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533789 0.566058 21.835807	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363866 1.020655 21.101213	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861237 3.258778 21.822162	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687851 2.788847 21.134244	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600477 2.806003 21.115973	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449555 3.258926 21.800676	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881734 8.192186 21.863588	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.685315 8.182943 21.545335	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.564521 8.269487 21.765765	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.423859 8.194798 21.831978	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825323 10.433199 21.149695	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.879399 10.614097 21.692685	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.535967 10.642151 21.574683	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301338 10.414456 21.069672	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 8.990193 8.133616 23.424327	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.718352 8.153285 24.159463	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.804312 7.658835 23.220176	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.897465 7.479343 23.681783	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.453768 10.519838 23.354904	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.508212 11.355704 23.983677	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 6.378996 12.688355 25.689659	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.789160 12.248750 26.527015	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.851993 13.597425 25.582833	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 5.402176 12.907000 25.934464	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.170044 8.768271 24.029628	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.141680 8.810463 25.943591	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 5.873602 8.691607 26.661700	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.291483 8.973850 26.828585	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 5.856706 7.785570 27.308458	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 5.692235 9.577050 27.313547	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.026300 8.621024 25.953144	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.432886 8.085341 27.484958	Si 5.759380 5.759380 17.715000

Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774333 0.549229 21.842656	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.533823 0.562865 21.839323	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364272 1.017663 21.102366	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861282 3.257248 21.815779	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686886 2.791025 21.134541	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.599748 2.802459 21.116059	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449233 3.257438 21.798127	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880204 8.194269 21.850666	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.673011 8.100205 21.599636	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.607077 8.098914 21.795701	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.422770 8.182530 21.838839	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.828012 10.430342 21.154426	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.883906 10.555285 21.664266	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.537456 10.392319 21.251670	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.298336 10.396944 21.070052	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.176544 8.025512 23.453696	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.942630 8.006325 24.142747	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.817472 7.571767 23.239993	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 4.931984 7.447336 23.755680	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.566199 10.518641 23.239367	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.817690 11.355172 23.844374	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 7.249609 12.401476 25.459255	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 7.956985 11.811999 25.972426	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 7.668183 13.343763 25.392148	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 6.431556 12.512900 26.077133	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.267489 8.725037 23.992557	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.121194 8.922255 25.729956	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.604504 8.952200 27.067882	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 9.654663 10.978274 26.675757	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 7.160908 8.256640 27.737747	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.677258 9.966235 27.525000	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.532751 8.654334 27.104799	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 9.250708 10.199995 27.327283	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.991235 10.664542 25.684022	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 10.029094 11.913036 27.105221	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	reaction-S10-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	116	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	26.538052	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 1.938717 1.020980 21.109251	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000

Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.423325 8.192183 21.826612	Si 7.679180 11.518770 15.000000
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.824968 10.423277 21.183828	Si 11.518770 11.518770 15.000000
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.804138 10.674968 21.398932	Si 1.919790 0.000000 16.357500
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.536599 10.427073 21.397315	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301917 10.403800 21.085273	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.208409 7.692726 23.387145	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 7.679180 5.759380 19.072500	H 9.929755 7.725250 24.120676	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 11.518770 5.759380 19.072500	N 5.886451 6.738833 23.046942	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 0.000000 9.598970 19.072500	H 5.054234 6.393951 23.543606	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.167498 9.521357 22.564626	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.450317 11.283828 24.214837	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 6.534192 11.885580 25.047931	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 9.290254 10.898337 27.032818	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.882450 12.803368 24.735008	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 5.574831 12.040825 25.386955	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.206331 8.063026 23.802781	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 6.952557 8.257430 25.500077	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 6.734814 8.504406 26.894475	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 10.179903 10.487282 27.538657	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 7.433347 7.908835 27.525034	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.897056 9.578499 27.133742	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.698488 8.236583 27.198868	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 9.891957 9.594923 28.119609	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 10.932937 10.204768 26.787170	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 10.606611 11.243868 28.216185	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	reaction-S11-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	116	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 1.937637 1.017349 21.117368	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 5.773687 0.548995 21.844164	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 9.534044 0.567396 21.831901	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 13.364204 1.016069 21.106138	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 1.860988 3.256919 21.814797	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 5.688914 2.797400 21.144934	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 9.598950 2.812103 21.123809	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 13.449225 3.256740 21.795338	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 1.878552 8.186303 21.860165	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 5.678741 7.842661 21.741495	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 9.625568 8.047017 21.774915	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500

Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.453768 10.519838 23.354904	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 6.508212 11.355704 23.983677	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 11.518770 9.598970 19.072500	N 6.378996 12.688355 25.689659	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 0.000000 13.438560 19.072500	H 6.789160 12.248750 26.527015	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 3.839590 13.438560 19.072500	H 6.851993 13.597425 25.582833	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 7.679180 13.438560 19.072500	H 5.402176 12.907000 25.934464	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 11.518770 13.438560 19.072500	Ti 7.170044 8.768271 24.029628	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 7.141680 8.810463 25.943591	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 5.873602 8.691607 26.661700	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 8.291483 8.973850 26.828585	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 5.856706 7.785570 27.308458	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 5.692235 9.577050 27.313547	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.026300 8.621024 25.953144	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 8.432886 8.085341 27.484958	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.220749 9.118930 26.245634	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.167423 9.861873 27.490603	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	reaction-S11-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	116	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	97.380492	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 1.938525 1.025564 21.106165	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 5.774382 0.546952 21.849386	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 9.533789 0.566058 21.835807	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 13.363866 1.020655 21.101213	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 1.861237 3.258778 21.822162	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 5.687851 2.788847 21.134244	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 9.600477 2.806003 21.115973	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 13.449555 3.258926 21.800676	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 1.881734 8.192186 21.863588	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 5.685315 8.182943 21.545335	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
Si 9.564521 8.269487 21.765765	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
Si 13.423859 8.194798 21.831978	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
Si 1.825323 10.433199 21.149695	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
Si 5.879399 10.614097 21.692685	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
Si 9.535967 10.642151 21.574683	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
Si 13.301338 10.414456 21.069672	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
N 8.990193 8.133616 23.424327	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 9.718352 8.153285 24.159463	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 5.804312 7.658835 23.220176	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 4.897465 7.479343 23.681783	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960

Si 11.375690 0.002390 20.482160	H 7.178586 7.193083 27.270085	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 6.101851 8.532924 27.798947	Si 13.438560 1.919790 17.715000
Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.601014 7.422292 26.479477	Si 1.919790 5.759380 17.715000
Si 7.636470 3.858940 20.509320	H 9.002229 8.627844 27.263143	Si 5.759380 5.759380 17.715000
Si 11.589620 3.836650 20.478310	H 9.454387 10.237068 26.411296	Si 9.598970 5.759380 17.715000
Si -0.017180 7.709710 20.521520	H 8.573350 10.246529 28.042583	Si 13.438560 5.759380 17.715000
Si 3.698340 7.718140 20.419410	reaction-S11-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
Si 7.703400 7.681920 20.510900	116	Si 5.759380 9.598970 17.715000
Si 11.589420 7.715140 20.414580	10.094695	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 1.938462 1.023315 21.109387	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 5.774263 0.551018 21.841869	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 9.533857 0.566742 21.834522	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 13.364114 1.018690 21.102832	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 1.861142 3.258356 21.819711	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 5.687425 2.789975 21.130651	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 9.600678 2.805468 21.112852	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 13.449351 3.257893 21.800128	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 1.881965 8.193810 21.864418	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 5.679380 8.177459 21.540799	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
Si 9.570255 8.228378 21.776125	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
Si 13.422901 8.184330 21.842040	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
Si 1.826048 10.435600 21.161956	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
Si 5.866517 10.601863 21.633644	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
Si 9.536874 10.578048 21.491963	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
Si 13.301698 10.402437 21.071447	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
N 9.021552 8.152084 23.444390	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 9.748472 8.111148 24.178762	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 5.811701 7.673183 23.223497	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 4.926785 7.556036 23.746930	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
N 6.516192 10.495586 23.276357	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 6.848401 11.315350 23.818539	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
N 7.216081 11.541571 26.427696	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 7.123667 9.913464 26.220083	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 7.854977 12.077453 27.045302	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 6.308674 11.591106 26.941778	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
Ti 7.180868 8.782220 23.994036	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
N 7.086919 8.856624 25.938407	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
C 6.462088 7.965657 26.915907	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
C 8.829690 9.700676 27.130575	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420

Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
Si 1.938349 1.024671 21.109939	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
Si 5.774158 0.549165 21.845012	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
Si 9.534017 0.566888 21.835660	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
Si 13.363751 1.018409 21.104345	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
Si 1.861056 3.259405 21.823480	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 5.687487 2.789623 21.132913	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 9.600813 2.807428 21.117583	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 13.449591 3.257931 21.800300	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 1.881406 8.185262 21.871337	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 5.676214 8.163687 21.539969	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 9.567516 8.292944 21.777041	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
Si 13.424217 8.196496 21.828089	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
Si 1.823844 10.427221 21.152005	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
Si 5.880350 10.585145 21.632619	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
Si 9.533270 10.687679 21.633124	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
Si 13.299772 10.421320 21.077997	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
N 9.027798 8.100293 23.437015	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 9.757635 8.047921 24.165023	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
N 5.804828 7.636704 23.212108	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 4.925414 7.409906 23.704126	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
N 6.642277 10.474473 23.227954	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 6.986524 11.321433 23.722317	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 7.917985 11.912873 26.392511	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 7.305315 9.515649 26.487640	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 8.143670 12.909688 26.522083	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 7.083193 11.746585 26.975756	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
Ti 7.185426 8.723510 24.004127	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
N 7.000124 8.729874 25.906938	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
C 6.393147 7.662142 26.710832	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
C 9.088935 11.148241 26.899516	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 7.145124 7.116489 27.320118	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 5.614328 8.056917 27.396290	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 5.906081 6.914103 26.055562	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 9.052872 10.095727 26.565912	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 9.998537 11.590489 26.447290	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938279 1.025786 21.106402
H 9.216976 11.170547 28.004036	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774539 0.544359 21.847919
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534287 0.562270 21.843933
reaction-13-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363428 1.031837 21.088563
119	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861382 3.260831 21.822649
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686838 2.782216 21.125509

Si 9.602099 2.803208 21.116024	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 13.449059 3.266872 21.807412	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 1.881704 8.209843 21.868950	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 5.681373 8.366892 21.642298	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
Si 9.677479 8.187311 21.488705	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
Si 13.349214 8.496881 21.749398	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
Si 1.831773 10.454618 21.190174	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
Si 5.754600 10.819666 21.619039	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
Si 9.566808 11.156317 22.040547	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
Si 13.308900 10.881233 21.577450	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
N 9.836632 9.491957 22.528264	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 5.586503 8.043511 23.360657	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.270891 7.112820 23.666016	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
N 5.760170 11.181168 23.332354	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
N 6.711095 9.620755 25.972388	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 7.163521 10.461272 26.352870	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 7.071672 8.787779 26.453281	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
Ti 5.501903 9.629245 24.483859	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 10.217720 11.720760 23.549230	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
Ti 11.349797 10.014595 23.837842	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 10.447422 12.716414 23.684454	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
N 13.129707 11.264582 23.378061	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 12.995256 12.268157 23.574760	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 13.927364 10.927125 23.938788	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
N 12.669567 8.537923 23.383446	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 12.593232 7.646421 23.902826	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 5.659612 12.164533 23.622660	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
N 11.051011 9.666789 25.692910	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 10.193154 9.967759 26.172466	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 11.551945 8.965123 26.252048	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
N 3.752681 9.656010 25.286733	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938741 1.030604 21.106840
H 2.887522 9.517675 24.746035	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774298 0.532647 21.857090
H 3.544899 9.697559 26.289200	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534039 0.563259 21.847369
reaction-13-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363954 1.036010 21.086613
119	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861474 3.265432 21.828064
94.284516	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686871 2.774120 21.130616
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601615 2.805470 21.118060
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449157 3.270570 21.810946
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880415 8.197562 21.896392
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.702229 8.352054 21.614669
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.669357 8.225401 21.482435
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.322813 8.495216 21.771358
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.826333 10.442046 21.199347

Si 5.770239 10.799045 21.606286	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
Si 9.557555 11.160379 22.012509	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
Si 13.296485 10.878938 21.581013	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
N 9.747071 9.502536 22.591821	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 5.845344 8.006458 23.354143	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 5.562801 7.091530 23.731292	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
N 5.987613 11.091772 23.350046	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
N 10.000713 9.547342 25.453694	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 9.450858 10.422262 25.481475	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 9.524209 8.663273 25.703936	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
Ti 6.496025 9.514517 24.310899	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 10.219816 11.770859 23.517463	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
Ti 11.325594 10.063739 23.829240	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 10.502132 12.761408 23.561011	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
N 13.127910 11.294336 23.376427	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 13.039834 12.304167 23.565401	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 13.927627 10.933320 23.919933	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
N 12.596619 8.545684 23.403815	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 12.548012 7.656571 23.938357	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 5.951258 12.060893 23.701044	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
N 11.659034 9.918242 25.991065	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 11.435674 10.265106 26.933268	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 12.133545 9.004431 26.104681	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
N 5.901805 9.490167 26.137017	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938323 1.029150 21.104889
H 4.897677 9.306584 26.279642	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774544 0.537624 21.857752
H 6.352620 9.556063 27.055189	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534300 0.555637 21.854550
reaction-13-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364218 1.039043 21.082602
119	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861242 3.261891 21.827311
82.625143	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686703 2.772637 21.117792
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601706 2.797518 21.113927
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449029 3.271098 21.817761
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879944 8.196789 21.894536
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.688554 8.385714 21.599122
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.671747 8.202911 21.487877
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.341345 8.493456 21.760212
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.828758 10.441342 21.199282
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.761936 10.837517 21.572560
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.567330 11.168377 22.027140
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.301236 10.873703 21.565072
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.813468 9.491131 22.604880
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	N 5.819147 8.040150 23.339182
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.592236 7.109247 23.713097
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.972259 11.182205 23.297528

N 10.341633 9.595580 25.658624	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 9.842581 10.503457 25.588818	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 9.670520 8.802048 25.681317	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
Ti 6.348532 9.596633 24.287349	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
N 10.237335 11.751929 23.547542	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
Ti 11.365357 10.032770 23.743483	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 10.460936 12.756592 23.641533	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
N 13.148442 11.272247 23.374104	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 13.049300 12.280791 23.563324	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 13.962884 10.919135 23.900645	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
N 12.647644 8.513021 23.410612	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 12.641543 7.611126 23.919486	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 5.903304 12.151852 23.644775	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
N 11.351644 9.653688 26.679449	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 10.996771 9.876936 27.620958	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 11.894064 8.787897 26.689238	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
N 5.496579 9.645223 26.003972	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 4.478495 9.477897 25.949043	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.937827 1.027357 21.104067
H 5.759240 9.715728 26.991116	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774261 0.548621 21.843337
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534672 0.564618 21.839199
reaction-14-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363840 1.024489 21.095872
113	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861080 3.262508 21.824428
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687576 2.787779 21.126467
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601027 2.803283 21.112391
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449082 3.261988 21.804033
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880568 8.169646 21.905642
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.696776 8.191066 21.591849
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.588735 8.286837 21.659278
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.329293 8.336614 21.789783
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.826553 10.386968 21.117458
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.886836 10.608779 21.640568
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.578553 10.683469 21.761762
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.299355 10.557172 21.031677
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.301141 8.142274 23.410912
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	N 6.006527 7.755824 23.272637
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.228381 7.457523 23.878122
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 6.646530 10.528123 23.256525
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 7.357291 8.844240 25.864056
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 7.841272 8.151997 26.449218
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 6.721688 9.412976 26.436365
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.452370 8.843527 23.954475
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 10.076229 10.793063 23.443110
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 10.844733 9.058077 24.091583

H 10.442020 11.693071 23.792213	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
N 10.908551 9.196989 25.996394	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 10.110574 9.533954 26.552364	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 11.642948 8.838476 26.618199	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
N 12.661442 8.447366 23.418644	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938346 1.033060 21.098350
H 13.371523 8.600689 24.160266	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774118 0.545707 21.849089
H 7.108024 11.396955 23.582606	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534554 0.557376 21.846948
reaction-14-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364221 1.031875 21.082450
113	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861411 3.264786 21.828234
87.676279	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687388 2.783030 21.123203
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600613 2.792464 21.100755
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449165 3.262736 21.808412
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881910 8.162211 21.906879
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.731011 8.269393 21.622889
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.633684 8.233257 21.653080
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.315509 8.357986 21.798774
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825984 10.382988 21.139646
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.843951 10.699075 21.587262
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.526104 10.648357 21.787723
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.298080 10.570685 21.051836
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.426892 7.921787 23.385253
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	N 6.112394 7.953094 23.341705
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.313245 7.704755 23.944964
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 6.605455 10.764746 23.205156
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 8.096309 9.044945 25.793953
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 8.064612 8.037285 26.029656
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 7.246343 9.457413 26.218810
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.658003 9.115104 23.594436
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 9.681341 10.681401 23.553543
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 10.767227 9.014746 24.002239
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	H 9.760740 11.595924 24.024098
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 9.258000 9.679016 26.567458
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	H 8.715051 9.944668 27.416526
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	H 9.821045 8.864928 26.893562
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	N 12.629239 8.441714 23.432610
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 13.379851 8.478208 24.146571
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 7.073236 11.673665 23.372516
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	reaction-14-product
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	113
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	85.615439
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	Si 7.679180 0.000000 15.000000

Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.734638 8.286805 21.626973
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.630401 8.227930 21.658518
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.315266 8.355032 21.797915
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.827240 10.384552 21.133939
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.844050 10.710120 21.595798
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.528311 10.654378 21.782345
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.300444 10.569431 21.052489
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.376982 7.933747 23.390100
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	N 6.077346 7.990325 23.357628
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.250678 7.777865 23.937928
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 6.559334 10.793030 23.235666
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 8.002595 9.066652 25.880024
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	H 7.843959 8.071068 26.128716
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	H 7.130952 9.544126 26.170256
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 7.617662 9.152571 23.639202
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 9.646544 10.711006 23.553151
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 10.740330 9.046832 23.943250
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	H 9.739955 11.633224 24.005931
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 9.063634 9.666518 26.742707
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	H 8.563626 9.776906 27.648343
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	H 9.735762 8.892396 26.931289
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	N 12.627886 8.499281 23.426907
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 13.359669 8.576828 24.156943
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 7.006719 11.709794 23.412044
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	*****
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	reaction-15-reactant
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	143
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	0.000000
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	Si 0.000000 0.000000 15.000000
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	Si 3.839590 0.000000 15.000000
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	Si 7.679180 0.000000 15.000000
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	Si 11.518770 0.000000 15.000000
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	Si 0.000000 3.839590 15.000000
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	Si 3.839590 3.839590 15.000000
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938430 1.031881 21.099564	Si 7.679180 3.839590 15.000000
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774013 0.545304 21.848601	Si 11.518770 3.839590 15.000000
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534421 0.558947 21.844512	Si 0.000000 7.679180 15.000000
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364387 1.027817 21.092316	Si 3.839590 7.679180 15.000000
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861445 3.264374 21.827299	Si 7.679180 7.679180 15.000000
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687458 2.783233 21.123922	Si 11.518770 7.679180 15.000000
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.600689 2.795729 21.104713	Si 0.000000 11.518770 15.000000
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449204 3.262725 21.808137	Si 3.839590 11.518770 15.000000
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.882844 8.167084 21.902787	Si 7.679180 11.518770 15.000000

Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	C 7.557422 11.167045 26.269452
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	C 7.337862 8.829224 26.906278
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 5.620588 9.724551 24.596030
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 10.142113 11.651566 23.616899
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 11.299103 9.862776 24.080014
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	H 10.404663 12.623430 23.822643
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 12.457449 10.877554 25.285792
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 11.911303 11.891574 26.191255
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 13.911911 10.803733 25.425855
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	N 12.776849 8.596413 23.392343
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 12.947267 7.818465 24.050903
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.540419 12.212247 23.588335
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	N 10.586956 8.545863 25.325073
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 9.662650 7.496909 24.874724
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	C 11.305581 8.121931 26.527136
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	N 4.057118 9.821039 25.733908
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 2.741196 9.664789 25.120681
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	C 3.948350 10.032586 27.172652
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 4.943046 10.171789 27.626690
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 3.451592 9.166689 27.671578
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 3.331545 10.932731 27.403287
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 2.830391 9.463417 24.036805
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938328 1.024158 21.110231	H 2.113339 10.578476 25.249556
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774546 0.544345 21.848290	H 2.180806 8.809121 25.566024
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534209 0.564642 21.840172	H 8.800753 7.926440 24.336744
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363695 1.022417 21.100744	H 9.270973 6.919773 25.739711
Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861314 3.260785 21.823888	H 10.171108 6.756598 24.205361
Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686807 2.783661 21.127967	H 11.979550 8.921575 26.873351
Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601866 2.802605 21.111601	H 11.917729 7.204612 26.344532
Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449138 3.261887 21.804135	H 10.598055 7.866370 27.350364
Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.875020 8.167860 21.850383	H 7.197287 11.943271 25.570819
Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.679126 8.387094 21.686823	H 8.663457 11.123100 26.169002
Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.672152 8.165797 21.469881	H 7.308922 11.483193 27.309067
Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.354022 8.394254 21.769164	H 6.910392 7.851616 26.615037
Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.826787 10.395857 21.124844	H 6.977507 9.069317 27.933967
Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.744705 10.833255 21.633032	H 8.442046 8.725462 26.959151
Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.576880 11.118261 22.104247	H 14.388217 11.791069 25.218181
Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.297517 10.604225 21.040122	H 14.324056 10.055368 24.729126
Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.853982 9.457739 22.482218	H 14.202139 10.520751 26.465830
Si 7.679180 5.759380 19.072500	N 5.591953 8.122193 23.414749	H 10.809273 11.926811 26.130542
Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.388414 7.163354 23.730756	H 12.306120 12.909310 25.958966
Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.699940 11.226202 23.336485	H 12.194038 11.670017 27.246937
Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 6.956667 9.868975 25.957748	reaction-15-TS

143	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.860913 3.262567 21.829083
40.298783	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686879 2.770253 21.113930
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601796 2.799164 21.115132
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.448647 3.265576 21.809966
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.883322 8.204564 21.882436
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.712645 8.369595 21.600329
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.670227 8.252001 21.428901
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.325383 8.554081 21.755806
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.825080 10.444495 21.184020
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.788109 10.800856 21.584016
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.571320 11.191872 21.980510
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.271732 10.919353 21.652853
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.746513 9.538055 22.494601
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	N 5.849727 8.035762 23.365052
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.580939 7.096153 23.699953
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 6.044742 11.102730 23.337124
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 8.223082 9.337798 25.911410
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	C 8.452658 10.787219 26.235469
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	C 7.685860 8.635550 27.120010
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 6.287137 9.547103 24.413208
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 10.266547 11.771988 23.461166
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 11.303160 10.029469 23.875120
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	H 10.652197 12.727622 23.500878
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 12.313908 10.954753 25.288903
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 12.003781 12.220778 25.953718
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 13.639164 10.502943 25.734117
Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160	N 12.612598 8.547581 23.395819
Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170	H 12.791379 7.725179 23.999957
Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600	H 5.918003 12.074472 23.664156
Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320	N 9.558382 8.732978 25.495864
Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310	C 9.271649 7.439646 24.833680
Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520	C 10.442943 8.486379 26.666416
Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410	N 4.926439 9.662761 25.754687
Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900	C 3.871749 8.680920 26.008161
Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580	C 4.641238 10.945835 26.401124
Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420	H 5.418533 11.699325 26.163152
Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 4.604772 10.835838 27.509827
Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 3.660854 11.355732 26.070637
Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 4.103029 7.717931 25.522314
Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.937461 1.029883 21.101294	H 2.897415 9.035193 25.604428
Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774933 0.536382 21.861588	H 3.744767 8.504721 27.102808
Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534530 0.559309 21.850143	H 8.495795 7.581413 24.058910
Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.362565 1.034305 21.083165	H 8.948009 6.654346 25.549863

H 10.202376 7.094205 24.341933	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 10.627831 9.421555 27.219930	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 11.414061 8.147369 26.262957	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 10.062965 7.695568 27.345809	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 7.965419 11.435290 25.482531	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 9.527565 11.028067 26.183064	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 8.066786 11.024765 27.244250	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 7.508235 7.569042 26.894719	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 6.714896 9.096509 27.361922	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 8.358481 8.730210 27.993729	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 14.413831 11.273161 25.501526	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 13.924144 9.566386 25.225604	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 13.659739 10.346950 26.839155	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 11.015744 12.600451 25.647789	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.937707 1.028334 21.100770
H 12.765708 12.997222 25.710185	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.775028 0.537312 21.860668
H 12.013325 12.107104 27.063720	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534513 0.561200 21.845765
reaction-15-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.361675 1.031958 21.085556
143	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.862283 3.261451 21.829101
26.160263	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687032 2.772601 21.116686
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.602758 2.802102 21.116848
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.448414 3.263554 21.806629
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.881418 8.202293 21.879042
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.675874 8.386339 21.583789
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.692143 8.257610 21.485765
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.363116 8.534958 21.718088
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.822993 10.447185 21.185150
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.761625 10.813927 21.579633
Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500	Si 9.585510 11.185026 22.023036
Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500	Si 13.289634 10.934572 21.667117
Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500	N 9.896396 9.540082 22.548185
Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500	N 5.466316 8.077693 23.339203
Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500	H 5.078140 7.161847 23.619711
Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500	N 5.809750 11.136744 23.345667
Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500	N 7.121214 9.174161 26.156114
Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500	C 7.416886 10.620181 26.442535
Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500	C 6.445005 8.523274 27.322715
Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500	Ti 5.627735 9.595446 24.462758
Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500	N 10.353898 11.840292 23.429398
Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500	Ti 11.649474 10.204001 23.643926
Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500	H 10.579218 12.841330 23.516283
Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210	N 12.169556 10.687366 25.458482
Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220	C 11.430253 11.535276 26.389540
Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960	C 13.465312 10.303648 26.024573

N 12.800463 8.550516 23.381997	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
H 12.882573 7.723094 23.994665	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
H 5.691078 12.125900 23.619602	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
N 8.383594 8.516464 25.753572	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
C 8.150608 7.226536 25.091621	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
C 9.335480 8.349862 26.868607	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
N 4.044293 9.824827 25.506161	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
C 3.062489 8.771807 25.771177	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 3.580015 11.140079 25.951232	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
H 4.332142 11.923227 25.738338	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 3.382021 11.141873 27.047657	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 2.635943 11.427139 25.438435	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 3.436916 7.786253 25.434764	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 2.114744 8.966989 25.224854	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 2.828621 8.708583 26.858974	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 7.450414 7.352749 24.249217	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 7.775950 6.422913 25.775028	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 9.122263 6.895199 24.691082	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 9.507715 9.306452 27.390137	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 10.296597 8.044129 26.420564	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 9.035810 7.575929 27.613413	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 6.989749 11.277968 25.653575	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 8.503337 10.799720 26.422206	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 7.000939 10.918503 27.422911	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 6.216945 7.471852 27.072472	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 5.495714 9.051753 27.510536	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 7.072662 8.553128 28.233841	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 14.074498 11.208246 26.259421	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 14.025909 9.679274 25.311741	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 13.339217 9.739093 26.979798	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 10.483239 11.865388 25.929225	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 12.020711 12.441656 26.657511	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938061 1.028376 21.102585
H 11.215265 11.005519 27.347675	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774257 0.547913 21.844096
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534693 0.563988 21.840258
reaction-16-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363846 1.025037 21.096026
125	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861090 3.262977 21.824515
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687498 2.786605 21.125679
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601094 2.801785 21.110326
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.448913 3.262516 21.805818
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879885 8.165929 21.905061
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.692940 8.183575 21.581065
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.574588 8.285112 21.697624
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.331229 8.338402 21.783014

Si 1.826733 10.384230 21.119562	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
Si 5.891295 10.597758 21.642557	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 9.576607 10.681853 21.748894	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 13.297880 10.551370 21.018962	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
N 9.280045 8.188136 23.455371	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
N 5.957610 7.734408 23.263138	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
H 5.152918 7.416181 23.823547	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 6.637865 10.513216 23.262051	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
N 7.114527 8.775810 25.892318	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
C 7.786653 7.774705 26.721058	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
C 6.187364 9.616901 26.649667	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
Ti 7.391970 8.811766 24.000089	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
N 10.127471 10.853552 23.418957	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
Ti 10.861716 9.132628 24.075485	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 10.633074 11.730523 23.629308	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 11.032340 9.402784 25.966005	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 10.505544 10.513804 26.755980	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
C 11.828775 8.459522 26.752125	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 12.683712 8.455542 23.415865	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 13.408399 8.566660 24.148468	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 7.119999 11.378523 23.568264	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 12.147372 7.598117 26.132426	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 11.247390 8.059239 27.612904	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 12.744545 8.947374 27.162106	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 9.927755 11.200533 26.112066	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 11.332783 11.085750 27.239214	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 9.835054 10.151767 27.570334	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 5.735712 10.378836 25.990550	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 6.711799 10.130842 27.489676	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 5.366425 9.006396 27.093687	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 8.473069 7.158507 26.111985	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.937851 1.031038 21.098761
H 7.051069 7.099041 27.212410	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774285 0.544352 21.849613
H 8.384650 8.260036 27.527148	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534390 0.559927 21.844350
reaction-16-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364111 1.027703 21.092581
125	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861139 3.263602 21.827137
36.481178	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.688019 2.780323 21.119959
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601162 2.795877 21.103819
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.448816 3.262992 21.808164
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.879775 8.165761 21.902854
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.719987 8.279623 21.615403
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.609967 8.234965 21.666185
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.328515 8.340519 21.788714
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.824570 10.382706 21.128442

Si 5.855980 10.690842 21.642064	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 9.549338 10.670468 21.761324	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
Si 13.298859 10.550147 21.021833	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
N 9.376856 8.075447 23.420002	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
N 6.160987 7.898133 23.309245	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
H 5.747782 7.053777 23.721231	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 6.600050 10.754443 23.268673	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
N 7.591529 9.043381 25.916081	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
C 7.802531 7.657923 26.432942	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
C 6.481979 9.734315 26.626936	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
Ti 7.589233 9.101172 23.779108	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
N 9.805510 10.762900 23.507719	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
Ti 10.831100 9.094682 24.051683	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 10.050386 11.701605 23.867515	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
N 10.887721 9.424500 26.008906	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 10.058264 10.257109 26.724610	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
C 11.718042 8.479253 26.773514	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
N 12.680033 8.469404 23.428400	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 13.422079 8.601409 24.137613	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 7.035729 11.669383 23.480617	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 11.978832 7.597328 26.156489	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 11.179952 8.118526 27.676152	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 12.661566 8.962782 27.099149	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 9.721757 11.168790 26.210340	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 10.203732 10.324439 27.814235	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 8.522067 9.575822 26.332495	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 6.332308 10.735087 26.188448	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 6.713278 9.830733 27.708495	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 5.545173 9.160167 26.507084	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 8.565464 7.146220 25.817652	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938003 1.032906 21.096490
H 6.855229 7.086864 26.378416	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774219 0.542642 21.852428
H 8.136384 7.686002 27.489973	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534206 0.558677 21.845950
reaction-16-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.364284 1.028990 21.091167
125	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861305 3.263982 21.828416
32.743898	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.687634 2.777709 21.117786
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601182 2.792835 21.098185
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.448911 3.263248 21.810167
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.880002 8.165855 21.901899
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.731969 8.291712 21.615374
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.617298 8.226511 21.673755
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.332168 8.337523 21.788984
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.824835 10.381001 21.133765
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.837243 10.719243 21.611417

Si 9.534557 10.657806 21.776084	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
Si 13.300298 10.547614 21.028877	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
N 9.414443 8.022076 23.422342	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
N 6.203112 7.965719 23.305098	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
H 6.143130 6.985902 23.620456	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 6.550561 10.857381 23.244538	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
N 7.547558 9.038759 25.788589	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 7.635803 7.612680 26.211331	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
C 6.348939 9.690365 26.391752	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
Ti 7.639336 9.237721 23.614949	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
N 9.638806 10.698242 23.555887	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
Ti 10.843969 9.067398 24.018431	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 9.734565 11.636427 23.980443	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
N 11.032364 9.445159 26.028466	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
C 10.308455 10.228557 26.840625	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
C 11.904583 8.453427 26.693920	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
N 12.694385 8.449948 23.434059	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 13.426307 8.575620 24.156485	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 6.933128 11.801671 23.422654	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 12.030355 7.552332 26.063508	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 11.487169 8.142661 27.672644	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 12.907574 8.893942 26.864224	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 9.796303 11.101471 26.416448	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 10.343015 10.098915 27.932994	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 8.397461 9.514591 26.187557	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 6.350209 10.765823 26.150691	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420
H 6.334166 9.550322 27.493320	Si 9.598970 1.919790 17.715000	Si 3.756900 11.521900 20.467440
H 5.443186 9.241543 25.948973	Si 13.438560 1.919790 17.715000	Si 7.769760 11.473880 20.434730
H 8.517599 7.143987 25.744239	Si 1.919790 5.759380 17.715000	Si 11.312270 11.508320 20.524900
H 6.728676 7.079901 25.878802	Si 5.759380 5.759380 17.715000	Si 1.938328 1.024158 21.110231
H 7.702743 7.532544 27.316245	Si 9.598970 5.759380 17.715000	Si 5.774546 0.544345 21.848290
*****	Si 13.438560 5.759380 17.715000	Si 9.534209 0.564642 21.840172
reaction-17-reactant	Si 1.919790 9.598970 17.715000	Si 13.363695 1.022417 21.100744
143	Si 5.759380 9.598970 17.715000	Si 1.861314 3.260785 21.823888
0.000000	Si 9.598970 9.598970 17.715000	Si 5.686807 2.783661 21.127967
Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000	Si 9.601866 2.802605 21.111601
Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000	Si 13.449138 3.261887 21.804135
Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000	Si 1.875020 8.167860 21.850383
Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000	Si 5.679126 8.387094 21.686823
Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000	Si 9.672152 8.165797 21.469881
Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500	Si 13.354022 8.394254 21.769164
Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500	Si 1.826787 10.395857 21.124844
Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500	Si 5.744705 10.833255 21.633032

Si 9.576880 11.118261 22.104247	H 14.388217 11.791069 25.218181	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 13.297517 10.604225 21.040122	H 14.324056 10.055368 24.729126	Si 13.438560 1.919790 17.715000
N 9.853982 9.457739 22.482218	H 14.202139 10.520751 26.465830	Si 1.919790 5.759380 17.715000
N 5.591953 8.122193 23.414749	H 10.809273 11.926811 26.130542	Si 5.759380 5.759380 17.715000
H 5.388414 7.163354 23.730756	H 12.306120 12.909310 25.958966	Si 9.598970 5.759380 17.715000
N 5.699940 11.226202 23.336485	H 12.194038 11.670017 27.246937	Si 13.438560 5.759380 17.715000
N 6.956667 9.868975 25.957748	reaction-17-TS	Si 1.919790 9.598970 17.715000
C 7.557422 11.167045 26.269452	143	Si 5.759380 9.598970 17.715000
C 7.337862 8.829224 26.906278	25.853015	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Ti 5.620588 9.724551 24.596030	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
N 10.142113 11.651566 23.616899	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Ti 11.299103 9.862776 24.080014	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
H 10.404663 12.623430 23.822643	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 12.457449 10.877554 25.285792	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
C 11.911303 11.891574 26.191255	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
C 13.911911 10.803733 25.425855	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 12.776849 8.596413 23.392343	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
H 12.947267 7.818465 24.050903	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
H 5.540419 12.212247 23.588335	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
N 10.586956 8.545863 25.325073	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
C 9.662650 7.496909 24.874724	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
C 11.305581 8.121931 26.527136	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 4.057118 9.821039 25.733908	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 2.741196 9.664789 25.120681	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 3.948350 10.032586 27.172652	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 4.943046 10.171789 27.626690	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500
H 3.451592 9.166689 27.671578	Si 5.759380 0.000000 16.357500	Si 0.000000 13.438560 19.072500
H 3.331545 10.932731 27.403287	Si 9.598970 0.000000 16.357500	Si 3.839590 13.438560 19.072500
H 2.830391 9.463417 24.036805	Si 13.438560 0.000000 16.357500	Si 7.679180 13.438560 19.072500
H 2.113339 10.578476 25.249556	Si 1.919790 3.839590 16.357500	Si 11.518770 13.438560 19.072500
H 2.180806 8.809121 25.566024	Si 5.759380 3.839590 16.357500	Si -0.022740 -0.026860 20.495210
H 8.800753 7.926440 24.336744	Si 9.598970 3.839590 16.357500	Si 3.928690 0.007500 20.482220
H 9.270973 6.919773 25.739711	Si 13.438560 3.839590 16.357500	Si 7.655010 0.029660 20.483960
H 10.171108 6.756598 24.205361	Si 1.919790 7.679180 16.357500	Si 11.375690 0.002390 20.482160
H 11.979550 8.921575 26.873351	Si 5.759380 7.679180 16.357500	Si -0.015140 3.816270 20.481170
H 11.917729 7.204612 26.344532	Si 9.598970 7.679180 16.357500	Si 3.719280 3.833050 20.497600
H 10.598055 7.866370 27.350364	Si 13.438560 7.679180 16.357500	Si 7.636470 3.858940 20.509320
H 7.197287 11.943271 25.570819	Si 1.919790 11.518770 16.357500	Si 11.589620 3.836650 20.478310
H 8.663457 11.123100 26.169002	Si 5.759380 11.518770 16.357500	Si -0.017180 7.709710 20.521520
H 7.308922 11.483193 27.309067	Si 9.598970 11.518770 16.357500	Si 3.698340 7.718140 20.419410
H 6.910392 7.851616 26.615037	Si 13.438560 11.518770 16.357500	Si 7.703400 7.681920 20.510900
H 6.977507 9.069317 27.933967	Si 1.919790 1.919790 17.715000	Si 11.589420 7.715140 20.414580
H 8.442046 8.725462 26.959151	Si 5.759380 1.919790 17.715000	Si -0.092140 11.529860 20.494420

Si 3.756900 11.521900 20.467440	H 3.511744 9.710279 27.738817	Si 5.759380 0.000000 16.357500
Si 7.769760 11.473880 20.434730	H 3.465636 11.422538 27.203458	Si 9.598970 0.000000 16.357500
Si 11.312270 11.508320 20.524900	H 2.856469 9.651111 24.041056	Si 13.438560 0.000000 16.357500
Si 1.938065 1.030383 21.104865	H 2.301222 10.990976 25.101668	Si 1.919790 3.839590 16.357500
Si 5.774157 0.540524 21.853896	H 2.124422 9.273168 25.619740	Si 5.759380 3.839590 16.357500
Si 9.534500 0.561781 21.844564	H 8.082535 8.803156 25.398704	Si 9.598970 3.839590 16.357500
Si 13.364049 1.026813 21.093926	H 9.163304 7.152243 25.946036	Si 13.438560 3.839590 16.357500
Si 1.860744 3.265000 21.829166	H 9.088238 7.745001 24.171610	Si 1.919790 7.679180 16.357500
Si 5.687089 2.778242 21.122548	H 11.999473 9.127517 26.859562	Si 5.759380 7.679180 16.357500
Si 9.601585 2.798890 21.106258	H 11.733057 7.380895 26.511336	Si 9.598970 7.679180 16.357500
Si 13.448681 3.262772 21.808487	H 10.562167 8.269702 27.534139	Si 13.438560 7.679180 16.357500
Si 1.876108 8.160664 21.875685	H 7.869312 11.427045 25.715529	Si 1.919790 11.518770 16.357500
Si 5.673015 8.385366 21.655768	H 8.910664 10.375771 26.717236	Si 5.759380 11.518770 16.357500
Si 9.675952 8.106985 21.531657	H 7.349854 10.970860 27.386326	Si 9.598970 11.518770 16.357500
Si 13.342572 8.393886 21.776548	H 6.161284 7.645902 26.525703	Si 13.438560 11.518770 16.357500
Si 1.826247 10.380651 21.119231	H 6.193803 8.939667 27.767956	Si 1.919790 1.919790 17.715000
Si 5.764269 10.826554 21.608987	H 7.675969 7.984401 27.426218	Si 5.759380 1.919790 17.715000
Si 9.569578 11.094045 22.053910	H 14.429461 11.893485 24.966398	Si 9.598970 1.919790 17.715000
Si 13.297569 10.600417 21.045801	H 14.325537 10.122938 24.635433	Si 13.438560 1.919790 17.715000
N 9.843645 9.446017 22.510098	H 14.267775 10.744823 26.329774	Si 1.919790 5.759380 17.715000
N 5.503516 8.116601 23.407206	H 10.895560 12.199356 25.954114	Si 5.759380 5.759380 17.715000
H 5.213147 7.171042 23.702762	H 12.428541 13.101282 25.693646	Si 9.598970 5.759380 17.715000
N 5.798055 11.199361 23.345978	H 12.282263 11.974833 27.075573	Si 13.438560 5.759380 17.715000
N 7.167807 9.427659 25.918023	reaction-17-product	Si 1.919790 9.598970 17.715000
C 7.858316 10.619642 26.468391	143	Si 5.759380 9.598970 17.715000
C 6.777953 8.449208 26.970760	11.458680	Si 9.598970 9.598970 17.715000
Ti 5.604866 9.696904 24.532958	Si 0.000000 0.000000 15.000000	Si 13.438560 9.598970 17.715000
N 10.134666 11.656473 23.580674	Si 3.839590 0.000000 15.000000	Si 1.919790 13.438560 17.715000
Ti 11.294065 9.958202 24.034370	Si 7.679180 0.000000 15.000000	Si 5.759380 13.438560 17.715000
H 10.417861 12.634071 23.734141	Si 11.518770 0.000000 15.000000	Si 9.598970 13.438560 17.715000
N 12.486283 11.022120 25.181132	Si 0.000000 3.839590 15.000000	Si 13.438560 13.438560 17.715000
C 11.995269 12.122785 26.008118	Si 3.839590 3.839590 15.000000	Si 0.000000 1.919790 19.072500
C 13.946237 10.936145 25.276441	Si 7.679180 3.839590 15.000000	Si 3.839590 1.919790 19.072500
N 12.731308 8.630636 23.399813	Si 11.518770 3.839590 15.000000	Si 7.679180 1.919790 19.072500
H 12.934685 7.885314 24.087806	Si 0.000000 7.679180 15.000000	Si 11.518770 1.919790 19.072500
H 5.712982 12.191636 23.612469	Si 3.839590 7.679180 15.000000	Si 0.000000 5.759380 19.072500
N 10.481618 8.723961 25.442099	Si 7.679180 7.679180 15.000000	Si 3.839590 5.759380 19.072500
C 9.341666 7.975402 25.225966	Si 11.518770 7.679180 15.000000	Si 7.679180 5.759380 19.072500
C 11.232728 8.364097 26.650229	Si 0.000000 11.518770 15.000000	Si 11.518770 5.759380 19.072500
N 4.116684 10.047826 25.714262	Si 3.839590 11.518770 15.000000	Si 0.000000 9.598970 19.072500
C 2.793880 9.991309 25.092857	Si 7.679180 11.518770 15.000000	Si 3.839590 9.598970 19.072500
C 4.035309 10.468298 27.109804	Si 11.518770 11.518770 15.000000	Si 7.679180 9.598970 19.072500
H 5.037759 10.644750 27.541144	Si 1.919790 0.000000 16.357500	Si 11.518770 9.598970 19.072500

Si 0.000000 13.438560 19.072500
 Si 3.839590 13.438560 19.072500
 Si 7.679180 13.438560 19.072500
 Si 11.518770 13.438560 19.072500
 Si -0.022740 -0.026860 20.495210
 Si 3.928690 0.007500 20.482220
 Si 7.655010 0.029660 20.483960
 Si 11.375690 0.002390 20.482160
 Si -0.015140 3.816270 20.481170
 Si 3.719280 3.833050 20.497600
 Si 7.636470 3.858940 20.509320
 Si 11.589620 3.836650 20.478310
 Si -0.017180 7.709710 20.521520
 Si 3.698340 7.718140 20.419410
 Si 7.703400 7.681920 20.510900
 Si 11.589420 7.715140 20.414580
 Si -0.092140 11.529860 20.494420
 Si 3.756900 11.521900 20.467440
 Si 7.769760 11.473880 20.434730
 Si 11.312270 11.508320 20.524900
 Si 1.938083 1.030299 21.104692
 Si 5.774302 0.536904 21.860622
 Si 9.534393 0.559747 21.848260
 Si 13.364576 1.029981 21.092528
 Si 1.861662 3.263858 21.830892
 Si 5.686856 2.774794 21.121877
 Si 9.601768 2.796573 21.104876
 Si 13.448789 3.264378 21.812746
 Si 1.881903 8.170286 21.891903
 Si 5.678943 8.383617 21.627397
 Si 9.677549 8.077694 21.549156
 Si 13.354526 8.390853 21.757370
 Si 1.830800 10.386523 21.135152
 Si 5.747611 10.832297 21.570330
 Si 9.580094 11.067580 22.044216
 Si 13.295820 10.611019 21.080558
 N 9.834580 9.419961 22.548942
 N 5.485614 8.129762 23.390460
 H 5.208827 7.187831 23.712952
 N 5.644633 11.259713 23.310697
 N 7.098438 9.643032 25.735169
 C 7.720155 10.930547 26.160957
 C 6.843662 8.752701 26.904053

Ti 5.352280 9.743978 24.416377
 N 10.180975 11.640293 23.568267
 Ti 11.356879 9.948824 23.972974
 H 10.502781 12.615881 23.664723
 N 12.510002 11.024733 25.154345
 C 12.036140 12.153222 25.958356
 C 13.966524 10.922541 25.265786
 N 12.768179 8.597133 23.398608
 H 12.986275 7.844332 24.072877
 H 5.482429 12.258527 23.521075
 N 10.623775 8.579057 25.446189
 C 9.614436 7.758603 25.234359
 C 11.384255 8.374709 26.695243
 N 3.941859 9.927491 25.712194
 C 2.705042 9.145318 25.648499
 C 3.924066 10.907953 26.793821
 H 4.821920 11.554986 26.763877
 H 3.886844 10.411000 27.791605
 H 3.035352 11.574973 26.722699
 H 2.728829 8.426098 24.806978
 H 1.830571 9.811789 25.478791
 H 2.527754 8.584830 26.595102
 H 7.799771 9.147768 25.148098
 H 9.341405 6.987189 25.972550
 H 9.094413 7.797331 24.267649
 H 11.906085 9.307624 26.964118
 H 12.146951 7.583431 26.541130
 H 10.721197 8.053543 27.524190
 H 7.879410 11.572370 25.277797
 H 8.700180 10.747225 26.644131
 H 7.056012 11.433021 26.886592
 H 6.350988 7.823131 26.567546
 H 6.177506 9.269879 27.617296
 H 7.792838 8.492745 27.417356
 H 14.461359 11.859491 24.920432
 H 14.340044 10.082827 24.659798
 H 14.276529 10.771260 26.328910
 H 10.937854 12.242401 25.905826
 H 12.480765 13.118800 25.618782
 H 12.328585 12.028824 27.029370

References

- ¹ J. Lu, S. Behtash and A. Heyden, *J. Phys. Chem. C*, 2012, **116**, 14328–14341.