

Electronic Supplementary Material (ESM)

for the contribution

Unprecedented Flexibility of the $>\text{Ti}=\text{Si}<$ Group for the Addition of H_2

by Łukasz Maj and Wojciech Grochala

Contents

Z-matrixes for all local minima and transition states detected at the B3LYP-6-311++G** level; H atoms No.15 and 16 originate from the H_2 molecule, which is attached to the $\text{Ti}_4\text{Si}_4\text{H}_6$ species.

(0) Ti₄Si₄H₆

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	2	B4	1	A3	3	D2
Ti	2	B5	1	A4	5	D3
H	6	B6	2	A5	1	D4
Si	6	B7	2	A6	1	D5
H	8	B8	6	A7	2	D6
Si	5	B9	2	A8	1	D7
H	10	B10	5	A9	2	D8
Si	5	B11	2	A10	1	D9
Si	5	B12	2	A11	1	D10
H	13	B13	5	A12	2	D11

B1	3.42681446
B2	1.72530824
B3	1.72530824
B4	3.42090701
B5	3.43686459
B6	1.72233140
B7	2.52335133
B8	1.49575586
B9	2.47848075
B10	1.49801840
B11	2.35534905
B12	2.47848075
B13	1.49801840
A1	139.68212712
A2	139.68212712
A3	59.94285929
A4	60.09668519
A5	145.92667289
A6	47.50389380
A7	126.79873954
A8	93.61798788
A9	126.34166104
A10	46.17144297
A11	47.61943522
A12	126.34166104
D1	0.00000000
D2	-133.26893478
D3	-71.39080479
D4	-148.24161345
D5	-58.20292252
D6	-137.45682167
D7	-35.38052191
D8	-171.11841406
D9	56.25560971
D10	-128.53115018
D11	-146.06930093

(I)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	2	B4	1	A3	3	D2
Ti	2	B5	1	A4	5	D3
H	6	B6	2	A5	1	D4
Si	6	B7	2	A6	1	D5
H	8	B8	6	A7	2	D6
Si	5	B9	2	A8	1	D7
H	10	B10	5	A9	2	D8
Si	5	B11	2	A10	1	D9
Si	5	B12	2	A11	1	D10
H	13	B13	5	A12	2	D11
H	5	B14	2	A13	1	D12
H	5	B15	2	A14	1	D13

B1	3.47647800
B2	1.72557025
B3	1.72557025
B4	3.37602278
B5	3.42669855
B6	1.72103680
B7	2.52270875
B8	1.49548848
B9	2.48721049
B10	1.49724470
B11	2.35913101
B12	2.48721049
B13	1.49724470
B14	2.05313252
B15	2.00744871
A1	143.12726883
A2	143.12726883
A3	59.01071624
A4	59.51827778
A5	145.18886243
A6	47.66890493
A7	128.52199616
A8	95.53787657
A9	132.20101133
A10	47.24270838
A11	48.08673122
A12	132.20101133
A13	123.63408382
A14	105.06011753
D1	0.00000000
D2	-135.21850459
D3	-71.91149557
D4	-147.83896735
D5	-57.57582229
D6	-136.67214935
D7	-35.72189768
D8	-170.64712333
D9	56.26611704
D10	-128.65517471
D11	-145.51610022
D12	113.55048328
D13	99.30021574

(II)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	1	B4	2	A3	4	D2
Ti	1	B5	5	A4	2	D3
H	6	B6	1	A5	5	D4
Si	6	B7	1	A6	5	D5
H	8	B8	6	A7	1	D6
Si	1	B9	8	A8	6	D7
H	10	B10	1	A9	8	D8
Si	5	B11	1	A10	10	D9
Si	2	B12	1	A11	10	D10
H	13	B13	2	A12	1	D11
H	5	B14	1	A13	6	D12
H	12	B15	5	A14	1	D13

B1	3.65199800
B2	1.71979583
B3	1.71979583
B4	3.40559912
B5	3.41675449
B6	1.71361980
B7	2.52778405
B8	1.49503102
B9	2.49799435
B10	1.49520688
B11	2.50491203
B12	2.49799435
B13	1.49520688
B14	1.71526181
B15	1.55406048
A1	146.57810548
A2	146.57810548
A3	57.57633009
A4	60.73667067
A5	143.65217639
A6	47.92739879
A7	131.27159994
A8	95.95617290
A9	130.20527538
A10	47.18839896
A11	90.71839667
A12	130.20527538
A13	136.53189739
A14	51.69882372
D1	0.00000000
D2	137.76070985
D3	-68.29548074
D4	-142.65909239
D5	123.30320317
D6	133.94867600
D7	0.42703592
D8	126.52427560
D9	178.83008340
D10	0.00000000
D11	-170.51572701
D12	159.62921320
D13	-133.03890830

(III)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	2	B4	1	A3	3	D2
Ti	2	B5	1	A4	5	D3
H	6	B6	2	A5	1	D4
Si	2	B7	1	A6	6	D5
H	8	B8	2	A7	1	D6
Si	6	B9	2	A8	1	D7
H	10	B10	6	A9	2	D8
Si	2	B11	1	A10	8	D9
Si	6	B12	2	A11	1	D10
H	13	B13	6	A12	2	D11
H	5	B14	2	A13	1	D12
H	12	B15	2	A14	1	D13

B1	3.53564704
B2	1.71851656
B3	1.71851656
B4	3.53564704
B5	3.53564704
B6	1.71851656
B7	2.54348868
B8	1.49616454
B9	2.54348868
B10	1.49616454
B11	2.54348868
B12	2.54348868
B13	1.49616454
B14	1.71851656
B15	1.49616454
A1	144.73561032
A2	144.73561032
A3	60.00000000
A4	60.00000000
A5	144.73561032
A6	45.96968450
A7	126.62456571
A8	91.36017602
A9	126.62456571
A10	45.96968450
A11	45.96968450
A12	126.62456571
A13	144.73561032
A14	126.62456571
D1	0.00000000
D2	-144.73561032
D3	-70.52877937
D4	-144.73561032
D5	-56.07333491
D6	-135.93793119
D7	35.26438968
D8	180.00000000
D9	-177.32455081
D10	126.60211428
D11	135.93793119
D12	144.73561032
D13	135.93793119

(IV)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	2	B4	1	A3	3	D2
Ti	5	B5	2	A4	1	D3
H	6	B6	5	A5	2	D4
Si	2	B7	1	A6	5	D5
H	8	B8	2	A7	1	D6
Si	5	B9	2	A8	1	D7
H	10	B10	5	A9	2	D8
Si	5	B11	2	A10	1	D9
Si	5	B12	2	A11	1	D10
H	13	B13	5	A12	2	D11
H	12	B14	5	A13	2	D12
H	12	B15	5	A14	2	D13

B1	3.40543200
B2	1.73551528
B3	1.73551528
B4	2.99384463
B5	3.08849750
B6	1.73227328
B7	2.49202837
B8	1.49335984
B9	2.43818923
B10	1.49246990
B11	2.46823277
B12	2.43818923
B13	1.49246990
B14	1.48602610
B15	1.56510796
A1	151.29899826
A2	151.29899826
A3	55.33766555
A4	64.07370364
A5	151.18061238
A6	46.90068107
A7	131.54398943
A8	107.37733490
A9	143.74355346
A10	58.08383048
A11	53.51318880
A12	143.74355346
A13	154.46478618
A14	52.77512457
D1	0.00000000
D2	-145.01092090
D3	-70.35766590
D4	-140.77378501
D5	-137.17793947
D6	-146.01389871
D7	-38.36568145
D8	-176.25515973
D9	64.49009259
D10	-132.54394484
D11	-137.50225344
D12	137.93040349
D13	137.93040349

(V)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	1	B4	2	A3	4	D2
Ti	5	B5	1	A4	2	D3
H	6	B6	5	A5	1	D4
Si	2	B7	1	A6	5	D5
H	8	B8	2	A7	1	D6
Si	5	B9	1	A8	8	D7
H	10	B10	5	A9	1	D8
Si	5	B11	1	A10	8	D9
Si	5	B12	1	A11	8	D10
H	13	B13	5	A12	1	D11
H	12	B14	5	A13	1	D12
H	12	B15	5	A14	1	D13

B1	3.19390275
B2	1.73557037
B3	1.73038880
B4	2.87318193
B5	2.73478976
B6	1.91281698
B7	2.46299396
B8	1.49450148
B9	2.49868486
B10	1.48874162
B11	2.46062432
B12	2.43264198
B13	1.49327599
B14	1.57503582
B15	1.55529568
A1	146.83456375
A2	153.28958327
A3	57.66520666
A4	66.55557169
A5	90.70264983
A6	50.48425616
A7	137.77489192
A8	59.27213417
A9	147.16961484
A10	57.81180234
A11	110.82599216
A12	142.82640998
A13	114.98123511
A14	121.07201441
D1	2.21120053
D2	133.23279219
D3	73.57942502
D4	87.49781645
D5	-129.89969174
D6	-144.44099979
D7	102.65341727
D8	111.87802673
D9	-99.51984597
D10	2.56416924
D11	-154.99020528
D12	-12.92501677
D13	97.75814600

(VI)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	2	B4	1	A3	3	D2
Ti	5	B5	2	A4	1	D3
H	6	B6	5	A5	2	D4
Si	2	B7	1	A6	5	D5
H	8	B8	2	A7	1	D6
Si	6	B9	5	A8	2	D7
H	10	B10	6	A9	5	D8
Si	1	B11	10	A10	6	D9
Si	5	B12	2	A11	1	D10
H	13	B13	5	A12	2	D11
H	5	B14	2	A13	1	D12
H	5	B15	2	A14	1	D13

B1	3.05155518
B2	1.72142085
B3	1.72138688
B4	3.20281359
B5	2.88765308
B6	1.72992117
B7	2.52048475
B8	1.49534744
B9	2.38015190
B10	1.49547297
B11	2.41289929
B12	2.36904629
B13	1.49359396
B14	1.91429803
B15	1.89362800
A1	132.92479969
A2	133.84305827
A3	63.46194578
A4	72.21004012
A5	132.93308502
A6	55.08703441
A7	132.11407197
A8	59.44737375
A9	151.80188492
A10	95.92308921
A11	52.99677457
A12	154.05445333
A13	116.80750004
A14	101.34037735
D1	-3.21204870
D2	-138.96111229
D3	-72.41366999
D4	-133.67366922
D5	-109.82230969
D6	-121.66225090
D7	117.88670305
D8	123.58272843
D9	88.80932624
D10	-137.97340112
D11	-159.71670616
D12	152.87028314
D13	174.29663241

(VII)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	1	B4	2	A3	4	D2
Ti	1	B5	2	A4	5	D3
H	6	B6	1	A5	2	D4
Si	6	B7	1	A6	2	D5
H	8	B8	6	A7	1	D6
Si	6	B9	1	A8	8	D7
H	10	B10	6	A9	1	D8
Si	5	B11	1	A10	10	D9
Si	2	B12	1	A11	12	D10
H	13	B13	2	A12	1	D11
H	5	B14	1	A13	12	D12
H	13	B15	2	A14	1	D13

B1	3.20478251
B2	1.71587194
B3	1.71700603
B4	3.36533428
B5	3.37500483
B6	1.71771706
B7	2.50233026
B8	1.49426944
B9	2.49289990
B10	1.49394074
B11	2.38736349
B12	2.60828616
B13	1.49171457
B14	1.71079848
B15	1.56724786
A1	134.20820317
A2	134.62283656
A3	62.43125348
A4	66.22621705
A5	146.41720643
A6	49.40844601
A7	128.67183618
A8	49.04906734
A9	128.87038815
A10	46.67460941
A11	95.74805850
A12	128.00866262
A13	120.69990708
A14	114.35333696
D1	-4.04738646
D2	127.64177662
D3	69.61462987
D4	146.21316547
D5	57.68095499
D6	132.55925074
D7	175.33324461
D8	-136.06905638
D9	170.46462740
D10	-91.84668185
D11	-163.64681097
D12	-76.04323110
D13	74.01829396

(VIII)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	1	B4	2	A3	4	D2
Ti	5	B5	1	A4	2	D3
H	6	B6	5	A5	1	D4
Si	1	B7	6	A6	5	D5
H	8	B8	1	A7	6	D6
Si	6	B9	5	A8	1	D7
H	10	B10	6	A9	5	D8
Si	5	B11	1	A10	8	D9
Si	5	B12	1	A11	12	D10
H	13	B13	5	A12	1	D11
H	10	B14	6	A13	5	D12
H	13	B15	5	A14	1	D13

B1	3.15769420
B2	1.71995705
B3	1.72380274
B4	3.21466123
B5	2.68745481
B6	1.73437038
B7	2.51739835
B8	1.49375877
B9	2.42893130
B10	1.49175047
B11	2.40210004
B12	2.52683040
B13	1.48827376
B14	1.60019799
B15	1.58604574
A1	128.33505916
A2	133.27309636
A3	64.10732734
A4	63.23650059
A5	115.54769487
A6	53.61095945
A7	132.66168789
A8	59.05233169
A9	149.62933079
A10	48.58562340
A11	97.11604584
A12	139.98865006
A13	110.30917944
A14	50.30260896
D1	6.67434335
D2	140.04169327
D3	82.44286869
D4	168.48984813
D5	-130.92988903
D6	-138.04534597
D7	65.97073993
D8	160.21908888
D9	-102.18802875
D10	86.92140167
D11	147.21394590
D12	15.38655766
D13	-162.63259637

(IX)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	2	B4	1	A3	3	D2
Ti	2	B5	1	A4	5	D3
H	6	B6	2	A5	1	D4
Si	2	B7	1	A6	5	D5
H	8	B8	2	A7	1	D6
Si	6	B9	2	A8	1	D7
H	10	B10	6	A9	2	D8
Si	2	B11	1	A10	8	D9
Si	2	B12	1	A11	8	D10
H	13	B13	2	A12	1	D11
H	12	B14	2	A13	1	D12
H	5	B15	2	A14	1	D13

B1	3.28066759
B2	1.71936430
B3	1.71413955
B4	3.23109213
B5	3.47607964
B6	1.72004587
B7	2.50929542
B8	1.49457559
B9	2.50235715
B10	1.49422524
B11	2.52226294
B12	2.49409067
B13	1.49409118
B14	1.58781741
B15	1.71744019
A1	141.50099009
A2	136.28320064
A3	61.18135328
A4	62.19640652
A5	145.79061348
A6	49.50393529
A7	131.48644810
A8	89.81214515
A9	133.22314879
A10	49.62366016
A11	96.18012121
A12	135.27532344
A13	115.46919125
A14	139.36275165
D1	-2.70737603
D2	-133.14229850
D3	-72.03088427
D4	-144.02466451
D5	-127.89754283
D6	-136.39364742
D7	35.41762841
D8	-179.41742266
D9	-171.15813236
D10	89.65314005
D11	175.29751905
D12	-42.30279513
D13	135.21686965

(X)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	1	B4	2	A3	4	D2
Ti	5	B5	1	A4	2	D3
H	6	B6	5	A5	1	D4
Si	6	B7	5	A6	1	D5
H	8	B8	6	A7	5	D6
Si	5	B9	1	A8	8	D7
H	10	B10	5	A9	1	D8
Si	2	B11	1	A10	8	D9
Si	6	B12	5	A11	1	D10
H	13	B13	6	A12	5	D11
H	12	B14	2	A13	1	D12
H	12	B15	2	A14	1	D13

B1	2.90179185
B2	1.73127738
B3	1.72561583
B4	3.04538261
B5	3.37826457
B6	1.72888939
B7	2.51916467
B8	1.49451630
B9	2.46623490
B10	1.60160065
B11	2.42165543
B12	2.44475837
B13	1.49783438
B14	1.59930106
B15	1.72985200
A1	128.59133304
A2	135.88721633
A3	65.29912325
A4	69.23875104
A5	147.87516325
A6	88.98158003
A7	122.65623928
A8	54.43147229
A9	50.43838549
A10	58.47920114
A11	47.12723463
A12	144.31948929
A13	121.47880271
A14	104.78379146
D1	-6.74139909
D2	127.85067268
D3	70.83859262
D4	138.69566198
D5	-23.83196908
D6	168.09394783
D7	76.12366989
D8	142.73368888
D9	177.34723775
D10	-125.56871626
D11	-154.93781254
D12	-109.23379323
D13	-28.24089939

(XI)

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	1	B4	2	A3	4	D2
Ti	2	B5	1	A4	5	D3
H	6	B6	2	A5	1	D4
Si	6	B7	2	A6	1	D5
H	8	B8	6	A7	2	D6
Si	5	B9	1	A8	8	D7
H	10	B10	5	A9	1	D8
Si	1	B11	8	A10	6	D9
Si	2	B12	1	A11	12	D10
H	13	B13	2	A12	1	D11
H	5	B14	1	A13	12	D12
H	12	B15	1	A14	8	D13

B1	3.13091860
B2	1.73120967
B3	1.71697021
B4	2.85228426
B5	3.12692068
B6	1.72950116
B7	2.43988766
B8	1.49504894
B9	2.42380994
B10	1.49968737
B11	2.47081861
B12	2.44984214
B13	1.49478638
B14	1.77589329
B15	1.54812249
A1	147.98632168
A2	133.33513948
A3	64.53192418
A4	67.98249938
A5	141.74273097
A6	54.16848669
A7	142.03632131
A8	65.24006185
A9	132.96166024
A10	103.76552751
A11	96.07786202
A12	148.93008002
A13	37.91620700
A14	122.75512965
D1	6.88741092
D2	146.23534621
D3	-75.52974032
D4	-165.95548433
D5	-56.78454002
D6	-114.98536374
D7	73.53986340
D8	83.79826482
D9	-91.01094501
D10	-96.08641110
D11	-178.95689255
D12	-102.27491023
D13	-6.22553892

TS I/II

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	2	B4	1	A3	3	D2
Ti	5	B5	2	A4	1	D3
H	6	B6	5	A5	2	D4
Si	1	B7	5	A6	2	D5
H	8	B8	1	A7	5	D6
Si	5	B9	2	A8	1	D7
H	10	B10	5	A9	2	D8
Si	5	B11	2	A10	1	D9
Si	5	B12	2	A11	1	D10
H	13	B13	5	A12	2	D11
H	5	B14	2	A13	1	D12
H	5	B15	2	A14	1	D13

B1	3.54693800
B2	1.72289897
B3	1.72289897
B4	3.32740957
B5	3.41027003
B6	1.71709540
B7	2.53420634
B8	1.49519861
B9	2.50714836
B10	1.49591754
B11	2.38772976
B12	2.50714836
B13	1.49591754
B14	1.80419092
B15	1.83026555
A1	145.59845790
A2	145.59845790
A3	57.79244247
A4	60.99510908
A5	147.10274625
A6	92.01504543
A7	128.13216681
A8	97.48090977
A9	135.37308264
A10	48.73130138
A11	48.53320598
A12	135.37308264
A13	117.32717219
A14	89.51013906
D1	0.00000000
D2	-135.34640557
D3	-69.55919616
D4	-142.45222732
D5	-31.81487292
D6	178.91054307
D7	-36.54886334
D8	-173.35926530
D9	56.44158312
D10	-128.00600391
D11	-140.85094089
D12	108.99606698
D13	89.69141885

TS II / III

Ti					
Ti	1	B1			
H	1	B2	2	A1	
H	2	B3	1	A2	3
Ti	2	B4	1	A3	3
Ti	2	B5	1	A4	5
H	6	B6	2	A5	1
Si	6	B7	2	A6	1
H	8	B8	6	A7	2
Si	5	B9	2	A8	1
H	10	B10	5	A9	2
Si	1	B11	10	A10	5
Si	5	B12	2	A11	1
H	13	B13	5	A12	2
H	5	B14	2	A13	1
H	12	B15	1	A14	10
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13

B1	3.56895200
B2	1.71843846
B3	1.71843846
B4	3.45801031
B5	3.48583699
B6	1.71642744
B7	2.49593354
B8	1.49578018
B9	2.50572316
B10	1.49547126
B11	2.49765045
B12	2.50572316
B13	1.49547126
B14	1.71864935
B15	1.50439497
A1	146.28456186
A2	146.28456186
A3	58.93292028
A4	59.20807411
A5	145.95533127
A6	47.30613237
A7	136.50253343
A8	94.24068974
A9	132.87714571
A10	94.88129056
A11	46.81269077
A12	132.87714571
A13	139.32357618
A14	134.03849539
D1	0.00000000
D2	-147.06608256
D3	-71.68023231
D4	-151.88657935
D5	-56.64745734
D6	-135.85277844
D7	-35.36497397
D8	-172.47950126
D9	1.62233123
D10	-127.66129260
D11	-142.95186797
D12	134.50745207
D13	84.05918050

TS III/IV

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Si	2	B4	1	A3	3	D2
H	5	B5	2	A4	1	D3
Ti	5	B6	2	A5	1	D4
H	7	B7	5	A6	2	D5
Si	1	B8	5	A7	2	D6
H	9	B9	1	A8	5	D7
Si	2	B10	1	A9	9	D8
H	11	B11	2	A10	1	D9
Ti	9	B12	1	A11	5	D10
Si	13	B13	9	A12	1	D11
H	13	B14	9	A13	1	D12
H	14	B15	13	A14	9	D13

B1	3.53239200
B2	1.72361414
B3	1.72361414
B4	2.48499304
B5	1.49778629
B6	2.65002119
B7	1.72074485
B8	2.44806866
B9	1.49434546
B10	2.44806866
B11	1.49434546
B12	2.64332677
B13	2.28401407
B14	1.71806269
B15	1.49146810
A1	142.21739404
A2	142.21739404
A3	44.70444947
A4	133.77887751
A5	83.22643151
A6	121.65860235
A7	97.50312677
A8	137.18585176
A9	94.01115286
A10	137.18585176
A11	73.31291198
A12	108.55741011
A13	131.64581130
A14	165.30916707
D1	0.00000000
D2	88.84428955
D3	-165.51094765
D4	83.10751332
D5	134.29606483
D6	88.12175677
D7	150.35903759
D8	0.00000000
D9	164.82770327
D10	-86.56497768
D11	-8.75226082
D12	-94.18494182
D13	-129.36192719

TS 0 / IV

Ti					
Ti	1	B1			
H	1	B2	2	A1	
H	2	B3	1	A2	3
Ti	2	B4	1	A3	3
Ti	5	B5	2	A4	1
H	6	B6	5	A5	2
Si	2	B7	1	A6	5
H	8	B8	2	A7	1
Si	5	B9	2	A8	1
H	10	B10	5	A9	2
Si	5	B11	2	A10	1
Si	5	B12	2	A11	1
H	13	B13	5	A12	2
H	12	B14	5	A13	2
H	12	B15	5	A14	2

B1	3.50856600
B2	1.73307918
B3	1.73307918
B4	3.18362009
B5	3.18245499
B6	1.72812896
B7	2.50987059
B8	1.49467660
B9	2.46029785
B10	1.49489022
B11	2.46790718
B12	2.46029785
B13	1.49489022
B14	1.62998148
B15	1.62497249
A1	155.87273701
A2	155.87273701
A3	56.56201948
A4	62.12129881
A5	148.96245026
A6	45.65689139
A7	130.29935628
A8	102.64370963
A9	137.24101783
A10	52.11972472
A11	50.42295061
A12	137.24101783
A13	128.41220352
A14	93.39173319
D1	0.00000000
D2	-153.02792676
D3	-69.55472795
D4	-141.43630164
D5	-134.87643112
D6	-145.97735182
D7	-36.31363000
D8	-173.70607018
D9	59.09020728
D10	-131.43573724
D11	-141.33495537
D12	135.72251501
D13	135.72251501

TS VI/VII

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	2	B4	1	A3	3	D2
Ti	5	B5	2	A4	1	D3
H	6	B6	5	A5	2	D4
Si	6	B7	5	A6	2	D5
H	8	B8	6	A7	5	D6
Si	6	B9	5	A8	2	D7
H	10	B10	6	A9	5	D8
Si	1	B11	8	A10	6	D9
Si	5	B12	2	A11	1	D10
H	13	B13	5	A12	2	D11
H	5	B14	2	A13	1	D12
H	5	B15	2	A14	1	D13

B1	3.09981327
B2	1.71908084
B3	1.71876485
B4	3.23705711
B5	2.97341594
B6	1.72487687
B7	2.51735836
B8	1.49455225
B9	2.38511747
B10	1.49456433
B11	2.42307075
B12	2.37697314
B13	1.49054685
B14	1.77740558
B15	1.78784368
A1	132.86809491
A2	132.56296299
A3	62.67775734
A4	70.65504449
A5	137.92802505
A6	96.41629552
A7	130.38723845
A8	58.08872280
A9	148.80962004
A10	101.15876891
A11	52.65575427
A12	147.10606325
A13	115.90060951
A14	91.23746817
D1	-1.74680823
D2	-137.48069286
D3	-72.04856694
D4	-133.79977797
D5	23.65245894
D6	175.92340107
D7	119.99498501
D8	128.13552979
D9	-84.69217225
D10	-137.97192124
D11	-161.04988486
D12	158.68287903
D13	-175.37244764

TS VII / VIII

Ti					
Ti	1	B1			
H	1	B2	2	A1	
H	2	B3	1	A2	3
Ti	1	B4	2	A3	4
Ti	5	B5	1	A4	2
H	6	B6	5	A5	1
Si	6	B7	5	A6	1
H	8	B8	6	A7	5
Si	6	B9	5	A8	1
H	10	B10	6	A9	5
Si	5	B11	1	A10	10
Si	2	B12	1	A11	12
H	13	B13	2	A12	1
H	5	B14	1	A13	12
H	13	B15	2	A14	1

B1	3.17125045
B2	1.71617078
B3	1.71746540
B4	3.31178770
B5	3.30974437
B6	1.72004793
B7	2.50809070
B8	1.49456694
B9	2.43152051
B10	1.49098061
B11	2.41006879
B12	2.58547858
B13	1.49181068
B14	1.71142844
B15	1.57231422
A1	132.74391589
A2	133.56226504
A3	63.00321786
A4	61.20879342
A5	142.80550185
A6	94.43669349
A7	128.31826529
A8	49.25592707
A9	137.98450960
A10	47.16339864
A11	96.56559226
A12	132.61936641
A13	106.66365819
A14	114.38201716
D1	-1.62896383
D2	131.45085753
D3	78.40620180
D4	153.64304592
D5	-37.42836034
D6	173.87958103
D7	61.00361467
D8	135.33896624
D9	167.64568511
D10	-89.85121854
D11	-153.02886931
D12	-102.07293173
D13	76.51243829

TS VII / IX

Ti						
Ti	1	B1				
H	1	B2	2	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1
Ti	1	B4	2	A3	4	D2
Ti	5	B5	1	A4	2	D3
H	6	B6	5	A5	1	D4
Si	2	B7	1	A6	5	D5
H	8	B8	2	A7	1	D6
Si	6	B9	5	A8	1	D7
H	10	B10	6	A9	5	D8
Si	5	B11	1	A10	10	D9
Si	6	B12	5	A11	1	D10
H	13	B13	6	A12	5	D11
H	5	B14	1	A13	10	D12
H	13	B15	6	A14	5	D13

B1	3.34099941
B2	1.71589181
B3	1.72280735
B4	3.23767256
B5	3.41937142
B6	1.71731931
B7	2.50821307
B8	1.49485212
B9	2.51106861
B10	1.49411361
B11	2.45288661
B12	2.55801495
B13	1.49141790
B14	1.72009314
B15	1.90115945
A1	134.23465929
A2	140.03205189
A3	63.92805723
A4	62.49795479
A5	147.95216858
A6	48.62038503
A7	132.49423366
A8	48.20679025
A9	128.51506918
A10	50.21937442
A11	48.93154096
A12	140.14944464
A13	136.31840157
A14	107.64531153
D1	2.51264139
D2	134.10649984
D3	70.03660647
D4	142.03621102
D5	-126.77803620
D6	-140.62710499
D7	59.27828746
D8	128.45489556
D9	179.65863929
D10	-126.51837157
D11	-135.45084091
D12	98.00709355
D13	41.83949581

TS XI/V

Ti					
Ti	1	B1			
H	1	B2	2	A1	
H	2	B3	1	A2	3
Ti	1	B4	2	A3	4
Ti	1	B5	2	A4	5
H	6	B6	1	A5	2
Si	6	B7	1	A6	2
H	8	B8	6	A7	1
Si	5	B9	1	A8	8
H	10	B10	5	A9	1
Si	5	B11	1	A10	8
Si	5	B12	1	A11	8
H	13	B13	5	A12	1
H	12	B14	5	A13	1
H	12	B15	5	A14	1

B1	3.18597478
B2	1.72214833
B3	1.71681484
B4	3.43647372
B5	3.47056089
B6	1.72459230
B7	2.51526330
B8	1.49507505
B9	2.49261816
B10	1.49777060
B11	2.42663955
B12	2.47229243
B13	1.49840444
B14	1.68781956
B15	1.66769494
A1	141.21598743
A2	139.71210929
A3	63.41883318
A4	62.86604915
A5	149.02901843
A6	46.61463067
A7	124.21976635
A8	49.16534786
A9	123.02294064
A10	49.29523222
A11	89.72546359
A12	122.98159962
A13	87.91745453
A14	101.58598803
D1	0.05758773
D2	134.33665259
D3	70.19767373
D4	141.42551665
D5	60.67546046
D6	140.90056204
D7	86.97045606
D8	131.73334657
D9	-101.40775052
D10	-5.11266788
D11	178.10266404
D12	-41.55404483
D13	116.55879915