

Computational Studies on the Interactions Among Redox Couples, Additives and TiO₂: Implications for Dye-Sensitized Solar Cells

Abu Md. Asaduzzaman and Georg Schreckenbach

Department of Chemistry, University of Manitoba, Winnipeg, Manitoba

Canada R3T 2N2

Supporting Information:

Full citation for reference 46:

M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, J. A. Pople and R. C. GAUSSIAN-03, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, Editon edn., 2004.

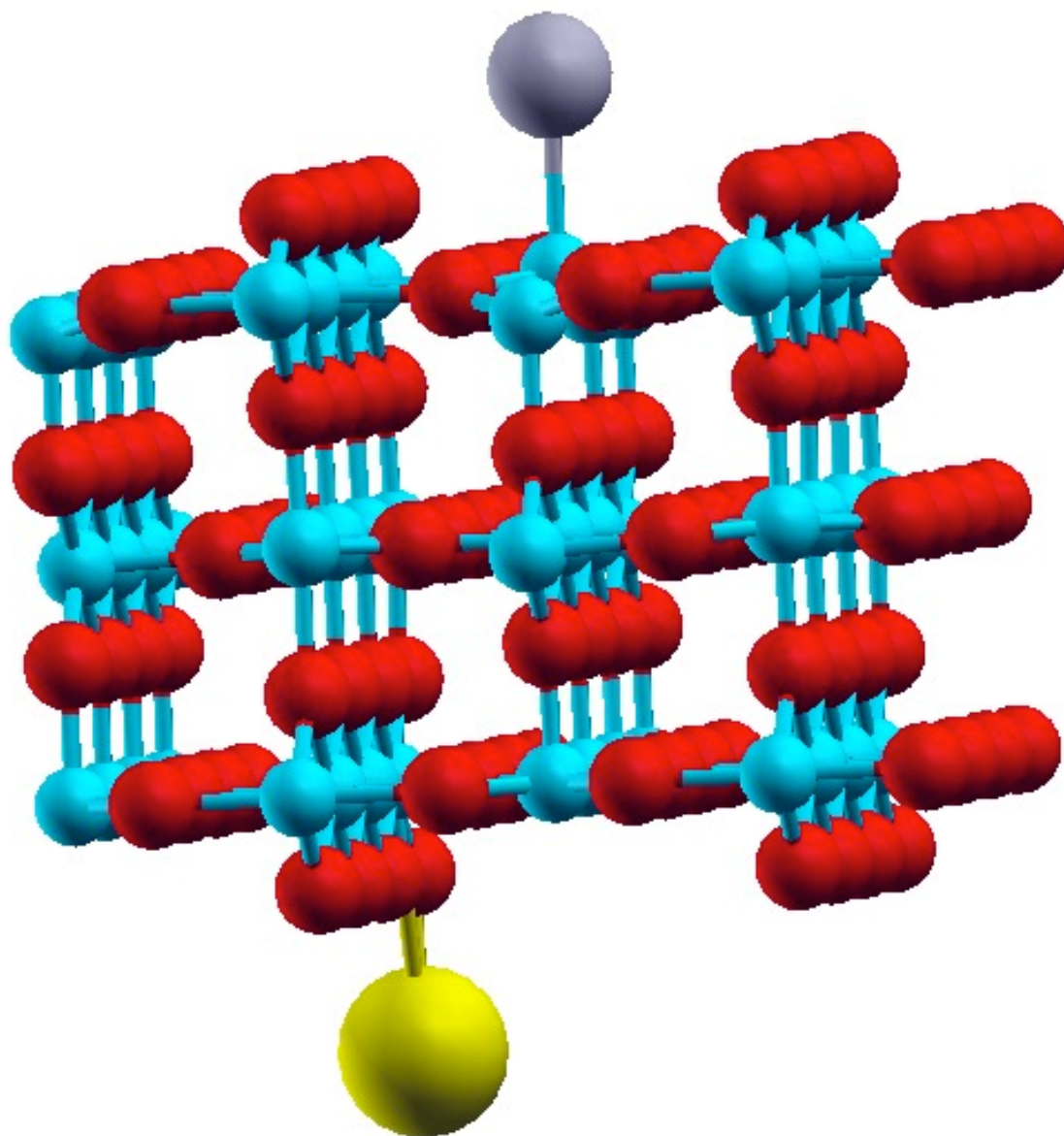


Figure S1: Optimized structure of Cs-I pair adsorption on the TiO_2 surface. The red, blue, grey and yellow color spheres represent oxygen, titanium, iodine and caesium atoms, respectively.

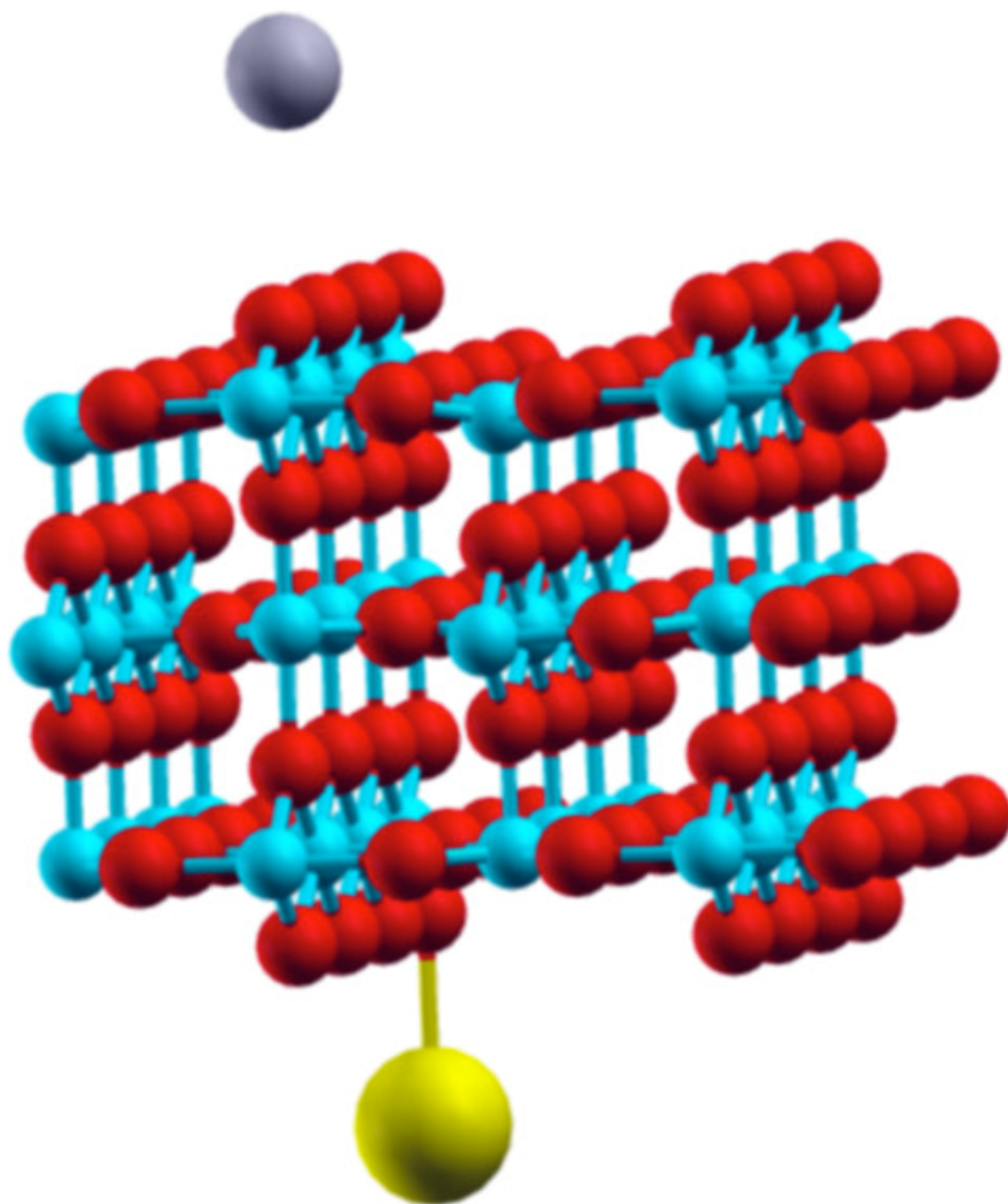


Figure S2: The second most stable structure for iodide adsorption on the TiO₂ (110) surface. The representation is as of Figure S1.

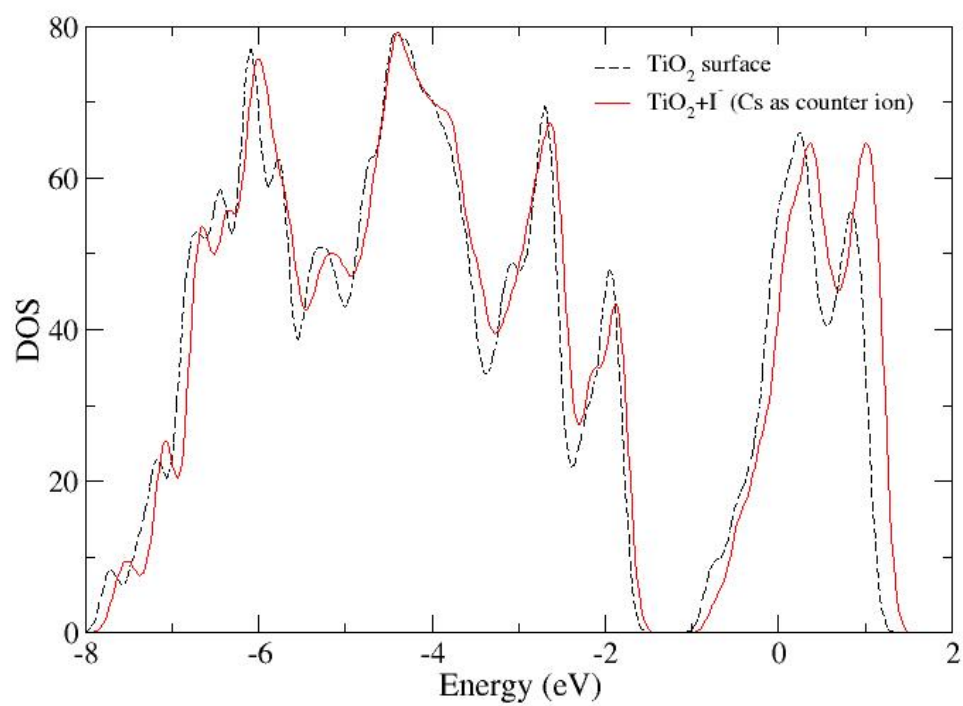


Figure S3: The density of states plot for clean (dotted line) and iodide with Cs counter ion adsorbed TiO₂ (red solid line).

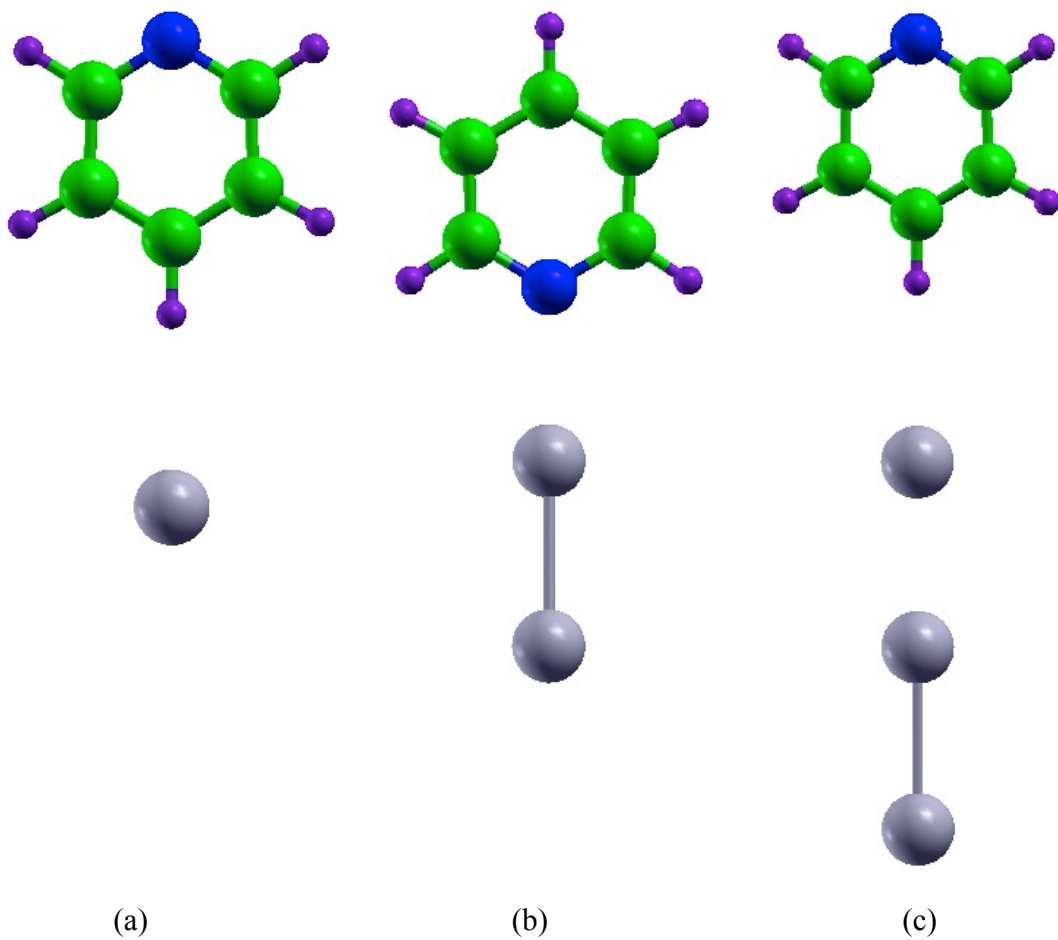


Figure S4: Optimized structures for (a) pyridine-iodide (b) pyridine-iodine molecule and (c) pyridine-triiodide using MP2. The green, blue, purple and grey color balls represent C, N, H and I atoms, respectively.

Coordinates of the Optimized Geometries:

TiO₂ (2X4) slab: a = 4.6567, c = 2.9761, u = 0.3044

O 1.22261000 0.00000000 8.38666000
O 1.22261000 2.97610000 8.38666000
O 1.22261000 5.95220000 8.38666000
O 1.22261000 8.92830000 8.38666000
O 1.22261000 0.00000000 8.38666000
O 7.80818000 2.97610000 8.38666000
O 7.80818000 5.95220000 8.38666000
O 7.80818000 8.92830000 8.38666000
O 5.36296000 0.00000000 8.38666000
O 5.36296000 2.97610000 8.38666000
O 5.36296000 5.95220000 8.38666000
O 5.36296000 8.92830000 8.38666000
O 11.94853000 0.00000000 8.38666000
O 11.94853000 2.97610000 8.38666000
O 11.94853000 5.95220000 8.38666000
O 11.94853000 8.92830000 8.38666000
O 3.29278000 1.48805000 9.48964000
O 3.29278000 4.46415000 9.48964000
O 3.29278000 7.44025000 9.48964000
O 3.29278000 10.41635000 9.48964000
O 9.87835000 1.48805000 9.48964000
O 9.87835000 4.46415000 9.48964000
O 9.87835000 7.44025000 9.48964000
O 9.87835000 10.41635000 9.48964000
O 3.29278000 1.48805000 6.92260000
O 3.29278000 4.46415000 6.92260000
O 3.29278000 7.44025000 6.92260000
O 3.29278000 10.41635000 6.92260000
O 9.87835000 1.48805000 6.92260000
O 9.87835000 4.46415000 6.92260000
O 9.87835000 7.44025000 6.92260000
O 9.87835000 10.41635000 6.92260000
O 1.95325000 0.00000000 4.93949000
O 1.95325000 2.97610000 4.93949000
O 1.95325000 5.95220000 4.93949000
O 1.95325000 8.92830000 4.93949000
O 8.53882000 0.00000000 4.93949000
O 8.53882000 2.97610000 4.93949000
O 8.53882000 5.95220000 4.93949000
O 8.53882000 8.92830000 4.93949000
O 4.63232000 0.00000000 4.93949000

O 4.63232000 2.97610000 4.93949000
O 4.63232000 5.95220000 4.93949000
O 4.63232000 8.92830000 4.93949000
O 11.21789000 0.00000000 4.93949000
O 11.21789000 2.97610000 4.93949000
O 11.21789000 5.95220000 4.93949000
O 11.21789000 8.92830000 4.93949000
O 0.00000000 1.48805000 3.56707000
O 0.00000000 4.46415000 3.56707000
O 0.00000000 7.44025000 3.56707000
O 0.00000000 10.41635000 3.56707000
O 6.58557000 1.48805000 3.56707000
O 6.58557000 4.46415000 3.56707000
O 6.58557000 7.44025000 3.56707000
O 6.58557000 10.41635000 3.56707000
O 0.00000000 1.48805000 6.19056000
O 0.00000000 4.46415000 6.19056000
O 0.00000000 7.44025000 6.19056000
O 0.00000000 10.41635000 6.19056000
O 6.58557000 1.48805000 6.19056000
O 6.58557000 4.46415000 6.19056000
O 6.58557000 7.44025000 6.19056000
O 6.58557000 10.41635000 6.19056000
O 1.28814000 0.00000000 1.64639000
O 1.28814000 2.97610000 1.64639000
O 1.28814000 5.95220000 1.64639000
O 1.28814000 8.92830000 1.64639000
O 7.87371000 0.00000000 1.64639000
O 7.87371000 2.97610000 1.64639000
O 7.87371000 5.95220000 1.64639000
O 7.87371000 8.92830000 1.64639000
O 5.29743000 0.00000000 1.64639000
O 5.29743000 2.97610000 1.64639000
O 5.29743000 5.95220000 1.64639000
O 5.29743000 8.92830000 1.64639000
O 11.88300000 0.00000000 1.64639000
O 11.88300000 2.97610000 1.64639000
O 11.88300000 5.95220000 1.64639000
O 11.88300000 8.92830000 1.64639000
O 3.29278000 1.48805000 3.01902000
O 3.29278000 4.46415000 3.01902000
O 3.29278000 7.44025000 3.01902000
O 3.29278000 10.41635000 3.01902000

O	9.87835000	1.48805000	3.01902000	Ti	9.87835000	10.41635000	4.99740000
O	9.87835000	4.46415000	3.01902000	Ti	3.29278000	0.00000000	1.64639000
O	9.87835000	7.44025000	3.01902000	Ti	3.29278000	2.97610000	1.64639000
O	9.87835000	10.41635000	3.01902000	Ti	3.29278000	5.95220000	1.64639000
O	3.29278000	1.48805000	0.35825000	Ti	3.29278000	8.92830000	1.64639000
O	3.29278000	4.46415000	0.35825000	Ti	9.87835000	0.00000000	1.64639000
O	3.29278000	7.44025000	0.35825000	Ti	9.87835000	2.97610000	1.64639000
O	3.29278000	10.41635000	0.35825000	Ti	9.87835000	5.95220000	1.64639000
O	9.87835000	1.48805000	0.35825000	Ti	9.87835000	8.92830000	1.64639000
O	9.87835000	4.46415000	0.35825000	Ti	0.00000000	1.48805000	1.64639000
O	9.87835000	7.44025000	0.35825000	Ti	0.00000000	4.46415000	1.64639000
O	9.87835000	10.41635000	0.35825000	Ti	0.00000000	7.44025000	1.64639000
Ti	3.29278000	0.00000000	8.39903000	Ti	0.00000000	10.41635000	1.64639000
Ti	3.29278000	2.97610000	8.39903000	Ti	6.58557000	1.48805000	1.64639000
Ti	3.29278000	5.95220000	8.39903000	Ti	6.58557000	4.46415000	1.64639000
Ti	3.29278000	8.92830000	8.39903000	Ti	6.58557000	7.44025000	1.64639000
Ti	9.87835000	0.00000000	8.39903000	Ti	6.58557000	10.41635000	1.646390
Ti	9.87835000	2.97610000	8.39903000	TiO2 + Na + I			
Ti	9.87835000	5.95220000	8.39903000	O	1.21353	0.00153	8.39029
Ti	9.87835000	8.92830000	8.39903000	O	1.21640	2.97380	8.39215
Ti	0.00000000	1.48805000	8.0468000	O	1.21640	5.95450	8.39215
Ti	0.00000000	4.46415000	8.0468000	O	1.21353	8.92677	8.39029
Ti	0.00000000	7.44025000	8.0468000	O	7.78989	0.00297	8.37362
Ti	0.00000000	10.41635000	8.0468000	O	7.81641	2.94598	8.30305
Ti	6.58557000	1.48805000	8.0468000	O	7.81641	5.98232	8.30305
Ti	6.58557000	4.46415000	8.0468000	O	7.78989	8.92533	8.37362
Ti	6.58557000	7.44025000	8.0468000	O	5.34337	11.89128	8.30895
Ti	6.58557000	10.41635000	8.0468000	O	5.34029	2.94410	8.32698
Ti	0.00000000	0.00000000	4.85633000	O	5.34029	5.98420	8.32698
Ti	0.00000000	2.97610000	4.85633000	O	5.34337	8.94142	8.30895
Ti	0.00000000	5.95220000	4.85633000	O	11.93975	-0.00150	8.38626
Ti	0.00000000	8.92830000	4.85633000	O	11.94681	2.98002	8.38819
Ti	6.58557000	0.00000000	4.85633000	O	11.94681	5.94828	8.38819
Ti	6.58557000	2.97610000	4.85633000	O	11.93975	8.92980	8.38626
Ti	6.58557000	5.95220000	4.85633000	O	3.29423	1.48781	9.49013
Ti	6.58557000	8.92830000	4.85633000	O	3.31077	4.46415	9.48752
Ti	3.29278000	1.48805000	4.99740000	O	3.29423	7.44049	9.49013
Ti	3.29278000	4.46415000	4.99740000	O	3.29220	10.41635	9.48998
Ti	3.29278000	7.44025000	4.99740000	O	9.86266	1.49198	9.48870
Ti	3.29278000	10.41635000	4.99740000	O	9.83895	4.46415	9.47867
Ti	9.87835000	1.48805000	4.99740000	O	9.86266	7.43632	9.48870
Ti	9.87835000	4.46415000	4.99740000	O	9.87278	10.41635	9.49291
Ti	9.87835000	7.44025000	4.99740000				

O	3.26051	1.48102	6.92055		O	1.28814	8.92830	1.64639
O	3.25427	4.46415	6.92581		O	7.87371	0.00000	1.64639
O	3.26051	7.44728	6.92055		O	7.87371	2.97610	1.64639
O	3.25649	10.41635	6.91763		O	7.87371	5.95220	1.64639
O	9.90509	1.48269	6.92226		O	7.87371	8.92830	1.64639
O	9.91608	4.46415	6.91848		O	5.29743	0.00000	1.64639
O	9.90509	7.44561	6.92226		O	5.29743	2.97610	1.64639
O	9.85453	10.41635	6.92702		O	5.29743	5.95220	1.64639
O	1.95335	11.89853	4.92996		O	5.29743	8.92830	1.64639
O	1.95806	2.96846	4.92765		O	11.88300	0.00000	1.64639
O	1.95806	5.95984	4.92765		O	11.88300	2.97610	1.64639
O	1.95335	8.93417	4.92996		O	11.88300	5.95220	1.64639
O	8.54960	0.00591	4.92741		O	11.88300	8.92830	1.64639
O	8.55596	2.96929	4.93906		O	3.28737	1.45255	2.99260
O	8.55596	5.95901	4.93906		O	3.28538	4.46415	3.01205
O	8.54960	8.92239	4.92741		O	3.28737	7.47575	2.99260
O	4.62439	-0.01094	4.92685		O	3.26714	10.41635	2.97324
O	4.60563	2.96401	4.93519		O	9.90140	1.48676	3.01463
O	4.60563	5.96429	4.93519		O	9.88842	4.46415	3.01712
O	4.62439	8.93924	4.92685		O	9.90140	7.44154	3.01463
O	11.22843	11.89813	4.94448		O	9.88096	10.41635	3.01753
O	11.23192	2.97629	4.93673		O	3.29278	1.48805	0.35825
O	11.23192	5.95201	4.93673		O	3.29278	4.46415	0.35825
O	11.22843	8.93457	4.94448		O	3.29278	7.44025	0.35825
O	0.02060	1.48366	3.56247		O	3.29278	10.41635	0.35825
O	0.02329	4.46415	3.56434		O	9.87835	1.48805	0.35825
O	0.02060	7.44464	3.56247		O	9.87835	4.46415	0.35825
O	0.01742	10.41635	3.55910		O	9.87835	7.44025	0.35825
O	6.58298	1.49780	3.54610		O	9.87835	10.41635	0.35825
O	6.56272	4.46415	3.56675		Ti	3.29037	0.00237	8.39907
O	6.58298	7.43050	3.54610		Ti	3.28178	2.97628	8.38844
O	6.58508	10.41635	3.54221		Ti	3.28178	5.95202	8.38844
O	0.01185	1.48816	6.18771		Ti	3.29037	8.92593	8.39907
O	0.02509	4.46415	6.18330		Ti	9.85697	-0.00016	8.39874
O	0.01185	7.44014	6.18771		Ti	9.88226	2.97183	8.38228
O	0.00987	10.41635	6.18971		Ti	9.88226	5.95647	8.38228
O	6.56675	1.47454	6.14527		Ti	9.85697	8.92846	8.39874
O	6.56225	4.46415	6.17706		Ti	-0.01183	1.48325	8.04284
O	6.56675	7.45376	6.14527		Ti	0.00589	4.46415	8.03915
O	6.61233	10.41635	6.13398		Ti	-0.01183	7.44505	8.04284
O	1.28814	0.00000	1.64639		Ti	-0.00497	10.41635	8.04521
O	1.28814	2.97610	1.64639		Ti	6.56576	1.49058	7.99583
O	1.28814	5.95220	1.64639		Ti	6.59499	4.46415	8.46632

This journal is © The Owner Societies 2010

Ti	6.56576	7.43772	7.99583			7.81754	2.94293	8.29860
Ti	6.58824	10.41635	7.98238			7.81754	5.98537	8.29860
Ti	0.00684	11.90369	4.85852			7.78772	8.92714	8.37044
Ti	-0.01474	2.97516	4.85372			5.34189	11.89293	8.30808
Ti	-0.01474	5.95314	4.85372			5.34087	2.94793	8.31655
Ti	0.00684	8.92901	4.85852			5.34087	5.98037	8.31655
Ti	6.58217	0.02134	4.80810			5.34189	8.93977	8.30808
Ti	6.57166	3.03704	4.93174			11.93728	-0.00194	8.38678
Ti	6.57166	5.89126	4.93174			11.94541	2.98018	8.38901
Ti	6.58217	8.90696	4.80810			11.94541	5.94812	8.38901
Ti	3.28931	1.49447	5.00380			11.93728	8.93024	8.38678
Ti	3.27394	4.46415	4.99751			3.29618	1.48792	9.48887
Ti	3.28931	7.43383	5.00380			3.31100	4.46415	9.48675
Ti	3.29152	10.41635	5.01617			3.29618	7.44038	9.48887
Ti	9.86700	1.48453	4.99364			3.29468	10.41635	9.49006
Ti	9.86321	4.46415	4.99783			9.85955	1.49132	9.48870
Ti	9.86700	7.44377	4.99364			9.83660	4.46415	9.47800
Ti	9.88761	10.41635	4.99815			9.85955	7.43698	9.48870
Ti	3.29278	0.00000	1.64639			9.86968	10.41635	9.49350
Ti	3.29278	2.97610	1.64639			3.25683	1.48272	6.92085
Ti	3.29278	5.95220	1.64639			3.25357	4.46415	6.92472
Ti	3.29278	8.92830	1.64639			3.25683	7.44558	6.92085
Ti	9.87835	0.00000	1.64639			3.25299	10.41635	6.91933
Ti	9.87835	2.97610	1.64639			9.90406	1.48169	6.92223
Ti	9.87835	5.95220	1.64639			9.91491	4.46415	6.91836
Ti	9.87835	8.92830	1.64639			9.90406	7.44661	6.92223
Ti	0.00000	1.48805	1.64639			9.84819	10.41635	6.92788
Ti	0.00000	4.46415	1.64639			1.94993	11.89997	4.93230
Ti	0.00000	7.44025	1.64639			1.95593	2.96991	4.92750
Ti	0.00000	10.41635	1.64639			1.95593	5.95839	4.92750
Ti	6.58557	1.48805	1.64639			1.94993	8.93273	4.93230
Ti	6.58557	4.46415	1.64639			8.54769	0.00529	4.92565
Ti	6.58557	7.44025	1.64639			8.55513	2.96884	4.93853
Ti	6.58557	10.41635	1.64639			8.55513	5.95946	4.93853
I	6.60600	4.46415	11.16290			8.54769	8.92301	4.92565
Na	3.30148	10.41635	-1.70563			4.62262	-0.00923	4.92920
						4.60737	2.96485	4.93631
TiO ₂ + K + I						4.60737	5.96345	4.93631
O	1.21073	0.00184	8.39182			4.62262	8.93753	4.92920
O	1.21412	2.97368	8.39375			11.22624	11.89766	4.94388
O	1.21412	5.95462	8.39375			11.23021	2.97684	4.93545
O	1.21073	8.92646	8.39182			11.23021	5.95146	4.93545
O	7.78772	0.00116	8.37044			11.22624	8.93504	4.94388

This journal is © The Owner Societies 2010

O	0.02018	1.48397	3.56258	O	3.29278	10.41635	0.35825
O	0.02179	4.46415	3.56358	O	9.87835	1.48805	0.35825
O	0.02018	7.44433	3.56258	O	9.87835	4.46415	0.35825
O	0.01625	10.41635	3.55911	O	9.87835	7.44025	0.35825
O	6.58143	1.49923	3.54510	O	9.87835	10.41635	0.35825
O	6.56290	4.46415	3.56632	Ti	3.28752	0.00113	8.39590
O	6.58143	7.42907	3.54510	Ti	3.28191	2.97567	8.38759
O	6.58169	10.41635	3.54148	Ti	3.28191	5.95263	8.38759
O	0.00461	1.48959	6.18879	Ti	3.28752	8.92717	8.39590
O	0.02297	4.46415	6.18381	Ti	9.85403	-0.00078	8.39787
O	0.00461	7.43871	6.18879	Ti	9.88248	2.97117	8.38205
O	0.00421	10.41635	6.19001	Ti	9.88248	5.95713	8.38205
O	6.57228	1.47319	6.14132	Ti	9.85403	8.92908	8.39787
O	6.56886	4.46415	6.18168	Ti	-0.01450	1.48362	8.04334
O	6.57228	7.45511	6.14132	Ti	0.00676	4.46415	8.03940
O	6.60708	10.41635	6.13234	Ti	-0.01450	7.44468	8.04334
O	1.28814	0.00000	1.64639	Ti	-0.00780	10.41635	8.04509
O	1.28814	2.97610	1.64639	Ti	6.56323	1.48968	7.99223
O	1.28814	5.95220	1.64639	Ti	6.60067	4.46415	8.43603
O	1.28814	8.92830	1.64639	Ti	6.56323	7.43862	7.99223
O	7.87371	0.00000	1.64639	Ti	6.58552	10.41635	7.98047
O	7.87371	2.97610	1.64639	Ti	0.01588	11.90398	4.85910
O	7.87371	5.95220	1.64639	Ti	-0.01047	2.97533	4.85390
O	7.87371	8.92830	1.64639	Ti	-0.01047	5.95297	4.85390
O	5.29743	0.00000	1.64639	Ti	0.01588	8.92872	4.85910
O	5.29743	2.97610	1.64639	Ti	6.59276	0.02077	4.80626
O	5.29743	5.95220	1.64639	Ti	6.57625	3.03566	4.92943
O	5.29743	8.92830	1.64639	Ti	6.57625	5.89264	4.92943
O	11.88300	0.00000	1.64639	Ti	6.59276	8.90753	4.80626
O	11.88300	2.97610	1.64639	Ti	3.29424	1.49426	5.00157
O	11.88300	5.95220	1.64639	Ti	3.27563	4.46415	4.99784
O	11.88300	8.92830	1.64639	Ti	3.29424	7.43404	5.00157
O	3.28567	1.45673	2.99713	Ti	3.30232	10.41635	5.01065
O	3.28810	4.46415	3.01227	Ti	9.87335	1.48506	4.99314
O	3.28567	7.47157	2.99713	Ti	9.86587	4.46415	4.99727
O	3.26487	10.41635	2.98493	Ti	9.87335	7.44324	4.99314
O	9.90095	1.48651	3.01469	Ti	9.89837	10.41635	4.99752
O	9.88618	4.46415	3.01716	Ti	3.29278	0.00000	1.64639
O	9.90095	7.44179	3.01469	Ti	3.29278	2.97610	1.64639
O	9.87877	10.41635	3.01736	Ti	3.29278	5.95220	1.64639
O	3.29278	1.48805	0.35825	Ti	3.29278	8.92830	1.64639
O	3.29278	4.46415	0.35825	Ti	9.87835	0.00000	1.64639
O	3.29278	7.44025	0.35825	Ti	9.87835	2.97610	1.64639

Ti	9.87835	5.95220	1.64639		9.90453	4.46415	6.91848
Ti	9.87835	8.92830	1.64639	O	9.87917	7.44824	6.91841
Ti	0.00000	1.48805	1.64639	O	9.84974	10.41635	6.92071
Ti	0.00000	4.46415	1.64639	O	1.94567	11.89958	4.93733
Ti	0.00000	7.44025	1.64639	O	1.93956	2.97269	4.93793
Ti	0.00000	10.41635	1.64639	O	1.93956	5.95561	4.93793
Ti	6.58557	1.48805	1.64639	O	1.94567	8.93312	4.93733
Ti	6.58557	4.46415	1.64639	O	8.54380	0.00191	4.92406
Ti	6.58557	7.44025	1.64639	O	8.54759	2.96915	4.94022
Ti	6.58557	10.41635	1.64639	O	8.54759	5.95915	4.94022
I	6.60781	4.46415	11.14905	O	8.54380	8.92639	4.92406
K	3.30448	10.41635	-2.06283	O	4.61176	11.90362	4.93033
TiO2 + Rb + I							
O	1.18722	-0.00091	8.38349	O	4.59727	2.97137	4.93663
O	1.19079	2.97575	8.38477	O	4.59727	5.95693	4.93663
O	1.19079	5.95255	8.38477	O	4.61176	8.92908	4.93033
O	1.18722	8.92921	8.38349	O	11.21596	11.90351	4.93446
O	7.77186	-0.00446	8.33715	O	11.21534	2.97755	4.92944
O	7.79921	2.94491	8.30368	O	11.21534	5.95075	4.92944
O	7.79921	5.98339	8.30368	O	11.21596	8.92919	4.93446
O	7.77186	8.93276	8.33715	O	0.01267	1.48551	3.55814
O	5.32321	11.89855	8.32172	O	0.01442	4.46415	3.56077
O	5.32281	2.94878	8.33944	O	0.01267	7.44279	3.55814
O	5.32281	5.97952	8.33944	O	0.00551	10.41635	3.55474
O	5.32321	8.93415	8.32172	O	6.57565	1.50088	3.54647
O	11.91360	11.90397	8.37851	O	6.56235	4.46415	3.56509
O	11.92378	2.97466	8.38836	O	6.57565	7.42742	3.54647
O	11.92378	5.95364	8.38836	O	6.57305	10.41635	3.54257
O	11.91360	8.92873	8.37851	O	-0.02787	1.48664	6.17938
O	3.26459	1.48750	9.48971	O	-0.02566	4.46415	6.18162
O	3.28132	4.46415	9.48786	O	-0.02787	7.44166	6.17938
O	3.26459	7.44080	9.48971	O	-0.02725	10.41635	6.17887
O	3.26718	10.41635	9.49042	O	6.55422	1.47684	6.14422
O	9.83945	1.48868	9.48499	O	6.55683	4.46415	6.17642
O	9.82738	4.46415	9.47651	O	6.55422	7.45146	6.14422
O	9.83945	7.43962	9.48499	O	6.57015	10.41635	6.12669
O	9.84240	10.41635	9.48920	O	1.28814	0.00000	1.64639
O	3.24860	1.48526	6.92205	O	1.28814	2.97610	1.64639
O	3.24639	4.46415	6.92624	O	1.28814	5.95220	1.64639
O	3.24860	7.44304	6.92205	O	1.28814	8.92830	1.64639
O	3.24980	10.41635	6.92056	O	7.87371	0.00000	1.64639
O	9.87917	1.48006	6.91841	O	7.87371	2.97610	1.64639
				O	7.87371	5.95220	1.64639
					7.87371	8.92830	1.64639

O	5.29743	0.00000	1.64639	Ti	0.07547	8.92856	4.85330
O	5.29743	2.97610	1.64639	Ti	6.67248	0.02220	4.80501
O	5.29743	5.95220	1.64639	Ti	6.61511	3.03717	4.93040
O	5.29743	8.92830	1.64639	Ti	6.61511	5.89113	4.93040
O	11.88300	0.00000	1.64639	Ti	6.67248	8.90610	4.80501
O	11.88300	2.97610	1.64639	Ti	3.34514	1.49023	5.00160
O	11.88300	5.95220	1.64639	Ti	3.30000	4.46415	5.00092
O	11.88300	8.92830	1.64639	Ti	3.34514	7.43807	5.00160
O	3.27218	1.46353	3.00065	Ti	3.37136	10.41635	5.00930
O	3.27560	4.46415	3.01451	Ti	9.92839	1.49752	4.99192
O	3.27218	7.46477	3.00065	Ti	9.88465	4.46415	4.99712
O	3.26398	10.41635	2.99132	Ti	9.92839	7.43078	4.99192
O	9.88241	1.48461	3.01363	Ti	9.96633	10.41635	4.99555
O	9.88121	4.46415	3.01508	Ti	3.29278	0.00000	1.64639
O	9.88241	7.44369	3.01363	Ti	3.29278	2.97610	1.64639
O	9.86973	10.41635	3.01573	Ti	3.29278	5.95220	1.64639
O	3.29278	1.48805	0.35825	Ti	3.29278	8.92830	1.64639
O	3.29278	4.46415	0.35825	Ti	9.87835	0.00000	1.64639
O	3.29278	7.44025	0.35825	Ti	9.87835	2.97610	1.64639
O	3.29278	10.41635	0.35825	Ti	9.87835	5.95220	1.64639
O	9.87835	1.48805	0.35825	Ti	9.87835	8.92830	1.64639
O	9.87835	4.46415	0.35825	Ti	0.00000	1.48805	1.64639
O	9.87835	7.44025	0.35825	Ti	0.00000	4.46415	1.64639
O	9.87835	10.41635	0.35825	Ti	0.00000	7.44025	1.64639
Ti	3.26970	0.00059	8.39504	Ti	0.00000	10.41635	1.64639
Ti	3.26510	2.97494	8.38916	Ti	6.58557	1.48805	1.64639
Ti	3.26510	5.95336	8.38916	Ti	6.58557	4.46415	1.64639
Ti	3.26970	8.92771	8.39504	Ti	6.58557	7.44025	1.64639
Ti	9.83522	-0.00190	8.39046	Ti	6.58557	10.41635	1.64639
Ti	9.86492	2.97019	8.38055	I	6.61699	4.46415	11.16744
Ti	9.86492	5.95811	8.38055	Rb	3.32230	10.41635	-2.22353
Ti	9.83522	8.93020	8.39046				
Ti	13.14158	1.48247	8.03571	TiO2 + Cs + I			
Ti	-0.02293	4.46415	8.03699	O	1.20961	0.00117	8.39192
Ti	13.14158	7.44583	8.03571	O	1.21373	2.97361	8.39214
Ti	13.13358	10.41635	8.03510	O	1.21373	5.95469	8.39214
Ti	6.55090	1.49185	7.99274	O	1.20961	8.92713	8.39192
Ti	6.57706	4.46415	8.46662	O	7.78361	0.00130	8.36305
Ti	6.55090	7.43645	7.99274	O	7.81396	2.94925	8.30763
Ti	6.55352	10.41635	7.97306	O	7.81396	5.97905	8.30763
Ti	0.07547	11.90414	4.85330	O	7.78361	8.92700	8.36305
Ti	0.03237	2.97581	4.85233	O	5.33992	11.89731	8.30725
Ti	0.03237	5.95249	4.85233	O	5.33944	2.94763	8.32353

This journal is © The Owner Societies 2010

O	5.33944	5.98067	8.32353		6.56942	4.46415	3.55857
O	5.33992	8.93539	8.30725	O	6.58150	7.43125	3.54335
O	11.93419	11.90264	8.38700	O	6.58126	10.41635	3.54110
O	11.94425	2.97926	8.38948	O	0.00112	1.48824	6.18938
O	11.94425	5.94904	8.38948	O	0.01999	4.46415	6.18463
O	11.93419	8.93006	8.38700	O	0.00112	7.44006	6.18938
O	3.29472	1.48872	9.48901	O	0.00013	10.41635	6.19104
O	3.31153	4.46415	9.48627	O	6.57296	1.47706	6.13921
O	3.29472	7.43958	9.48901	O	6.55694	4.46415	6.16347
O	3.29403	10.41635	9.49002	O	6.57296	7.45124	6.13921
O	9.85458	1.49062	9.48739	O	6.60150	10.41635	6.12977
O	9.83864	4.46415	9.47878	O	1.28814	0.00000	1.64639
O	9.85458	7.43768	9.48739	O	1.28814	2.97610	1.64639
O	9.86314	10.41635	9.49165	O	1.28814	5.95220	1.64639
O	3.25882	1.48253	6.92019	O	1.28814	8.92830	1.64639
O	3.25303	4.46415	6.92360	O	7.87371	0.00000	1.64639
O	3.25882	7.44577	6.92019	O	7.87371	2.97610	1.64639
O	3.25503	10.41635	6.91913	O	7.87371	5.95220	1.64639
O	9.89972	1.48225	6.92090	O	7.87371	8.92830	1.64639
O	9.91442	4.46415	6.91873	O	5.29743	0.00000	1.64639
O	9.89972	7.44605	6.92090	O	5.29743	2.97610	1.64639
O	9.84915	10.41635	6.92610	O	5.29743	5.95220	1.64639
O	1.94876	11.89873	4.93465	O	5.29743	8.92830	1.64639
O	1.95349	2.96909	4.92863	O	11.88300	0.00000	1.64639
O	1.95349	5.95921	4.92863	O	11.88300	2.97610	1.64639
O	1.94876	8.93397	4.93465	O	11.88300	5.95220	1.64639
O	8.54671	0.00518	4.92491	O	11.88300	8.92830	1.64639
O	8.55670	2.97050	4.93679	O	3.28283	1.45508	2.99590
O	8.55670	5.95780	4.93679	O	3.28459	4.46415	3.01178
O	8.54671	8.92312	4.92491	O	3.28283	7.47322	2.99590
O	4.62181	11.89659	4.92809	O	3.26427	10.41635	2.98299
O	4.60397	2.96485	4.93303	O	9.90125	1.48649	3.01236
O	4.60397	5.96345	4.93303	O	9.89171	4.46415	3.01492
O	4.62181	8.93611	4.92809	O	9.90125	7.44181	3.01236
O	11.22403	11.89791	4.94252	O	9.87751	10.41635	3.01509
O	11.22922	2.97614	4.93504	O	3.29278	1.48805	0.35825
O	11.22922	5.95216	4.93504	O	3.29278	4.46415	0.35825
O	11.22403	8.93479	4.94252	O	3.29278	7.44025	0.35825
O	0.01889	1.48295	3.56270	O	3.29278	10.41635	0.35825
O	0.02140	4.46415	3.56416	O	9.87835	1.48805	0.35825
O	0.01889	7.44535	3.56270	O	9.87835	4.46415	0.35825
O	0.01535	10.41635	3.55936	O	9.87835	7.44025	0.35825
O	6.58150	1.49705	3.54335	O	9.87835	10.41635	0.35825

$$\text{TiO}_2 + \text{Na} + \text{Br}$$

This journal is © The Owner Societies 2010

O	1.94065	2.97305	4.92747	O	11.88300	0.00000	1.64639
O	1.94065	5.95525	4.92747	O	11.88300	2.97610	1.64639
O	1.94110	8.93164	4.92760	O	11.88300	5.95220	1.64639
O	8.54256	0.00406	4.92173	O	11.88300	8.92830	1.64639
O	8.56379	2.96653	4.92971	O	3.27075	1.45988	2.99054
O	8.56378	5.96177	4.92971	O	3.26876	4.46415	3.00571
O	8.54256	8.92424	4.92172	O	3.27075	7.46842	2.99054
O	4.60765	11.90012	4.92570	O	3.26333	10.41635	2.97477
O	4.59750	2.96952	4.92874	O	9.90186	1.48237	2.99949
O	4.59750	5.95877	4.92874	O	9.89844	4.46417	3.00197
O	4.60765	8.93258	4.92570	O	9.90186	7.44594	2.99950
O	11.20858	11.89809	4.93202	O	9.86033	10.41634	3.00444
O	11.21379	2.97552	4.93192	O	3.29278	1.48805	0.35825
O	11.21378	5.95277	4.93191	O	3.29278	4.46415	0.35825
O	11.20857	8.93462	4.93201	O	3.29278	7.44025	0.35825
O	13.15523	1.48549	3.55648	O	3.29278	10.41635	0.35825
O	13.15226	4.46416	3.55938	O	9.87835	1.48805	0.35825
O	13.15524	7.44281	3.55648	O	9.87835	4.46415	0.35825
O	13.15767	10.41635	3.55406	O	9.87835	7.44025	0.35825
O	6.57907	1.49229	3.53922	O	9.87835	10.41635	0.35825
O	6.58495	4.46415	3.54524	Ti	3.27850	0.00258	8.39840
O	6.57907	7.43602	3.53922	Ti	3.27599	2.97838	8.39188
O	6.57440	10.41633	3.54156	Ti	3.27599	5.94992	8.39188
O	13.14276	1.48625	6.17492	Ti	3.27850	8.92572	8.39840
O	13.14572	4.46415	6.17671	Ti	9.83477	11.90419	8.39393
O	13.14277	7.44205	6.17492	Ti	9.85542	2.97372	8.38870
O	13.14318	10.41635	6.17527	Ti	9.85542	5.95458	8.38870
O	6.55479	1.48398	6.13901	Ti	9.83477	8.92852	8.39394
O	6.57772	4.46415	6.12304	Ti	13.14139	1.48423	8.03526
O	6.55479	7.44432	6.13902	Ti	13.14968	4.46415	8.03614
O	6.57043	10.41635	6.12339	Ti	13.14139	7.44408	8.03526
O	1.28814	0.00000	1.64639	Ti	13.13903	10.41635	8.03523
O	1.28814	2.97610	1.64639	Ti	6.55266	1.51175	7.99222
O	1.28814	5.95220	1.64639	Ti	6.57842	4.46415	8.69644
O	1.28814	8.92830	1.64639	Ti	6.55266	7.41656	7.99222
O	7.87371	0.00000	1.64639	Ti	6.55726	10.41635	7.97282
O	7.87371	2.97610	1.64639	Ti	0.05845	11.90427	4.85352
O	7.87371	5.95220	1.64639	Ti	0.04416	2.97615	4.85192
O	7.87371	8.92830	1.64639	Ti	0.04413	5.95215	4.85191
O	5.29743	0.00000	1.64639	Ti	0.05845	8.92843	4.85352
O	5.29743	2.97610	1.64639	Ti	6.66036	0.02412	4.80753
O	5.29743	5.95220	1.64639	Ti	6.63156	3.04353	4.92712
O	5.29743	8.92830	1.64639	Ti	6.63158	5.88478	4.92712

Ti	6.66037	8.90418	4.80754	0	11.91659	5.95200	8.38046
Ti	3.34382	1.48774	5.00686	0	11.90896	8.93032	8.37065
Ti	3.32649	4.46416	5.00357	0	3.25943	1.48711	9.49003
Ti	3.34381	7.44056	5.00686	0	3.25371	4.46415	9.48993
Ti	3.35106	10.41635	5.01594	0	3.25943	7.44119	9.49003
Ti	9.92530	1.49895	5.00209	0	3.26266	10.41635	9.48984
Ti	9.90993	4.46409	5.00736	0	9.84796	1.48564	9.48876
Ti	9.92529	7.42931	5.00209	0	9.84393	4.46415	9.48520
Ti	9.94627	10.41634	5.00452	0	9.84796	7.44266	9.48876
Ti	3.29278	0.00000	1.64639	0	9.83650	10.41635	9.48847
Ti	3.29278	2.97610	1.64639	0	3.25451	1.48725	6.92098
Ti	3.29278	5.95220	1.64639	0	3.25069	4.46415	6.92534
Ti	3.29278	8.92830	1.64639	0	3.25451	7.44105	6.92098
Ti	9.87835	0.00000	1.64639	0	3.25104	10.41635	6.91804
Ti	9.87835	2.97610	1.64639	0	9.87074	1.48438	6.91932
Ti	9.87835	5.95220	1.64639	0	9.87455	4.46415	6.92107
Ti	9.87835	8.92830	1.64639	0	9.87074	7.44392	6.91932
Ti	0.00000	1.48805	1.64639	0	9.84794	10.41635	6.91882
Ti	0.00000	4.46415	1.64639	0	1.94120	11.90120	4.93168
Ti	0.00000	7.44025	1.64639	0	1.94061	2.97310	4.93584
Ti	0.00000	10.41635	1.64639	0	1.94061	5.95520	4.93584
Ti	6.58557	1.48805	1.64639	0	1.94120	8.93150	4.93168
Ti	6.58557	4.46415	1.64639	0	8.54148	0.00384	4.92292
Ti	6.58557	7.44025	1.64639	0	8.56212	2.96427	4.92669
Ti	6.58557	10.41635	1.64639	0	8.56212	5.96403	4.92669
Br	6.60921	4.46415	11.05253	0	8.54148	8.92446	4.92292
Na	3.34313	10.41635	-1.70532	0	4.60812	11.90242	4.92840
TiO2 + K + Br							
O	1.18481	-0.00015	8.37431	0	4.59732	5.95722	4.93016
O	1.18730	2.97388	8.37626	0	4.60812	8.93028	4.92840
O	1.18730	5.95442	8.37626	0	11.20793	11.90000	4.93165
O	1.18481	8.92845	8.37431	0	11.21396	2.97747	4.93135
O	7.77013	0.00303	8.33174	0	11.21396	5.95083	4.93135
O	7.78973	2.95043	8.37361	0	11.20793	8.93270	4.93165
O	7.78973	5.97787	8.37361	0	-0.00378	1.48702	3.55359
O	7.77013	8.92527	8.33174	0	0.00976	4.46415	3.55636
O	5.32348	11.90402	8.32265	0	-0.00378	7.44128	3.55359
O	5.32722	2.96787	8.38408	0	-0.01321	10.41635	3.55351
O	5.32722	5.96043	8.38408	0	6.57854	1.49028	3.54004
O	5.32348	8.92868	8.32265	0	6.58351	4.46415	3.54429
O	11.90896	11.90238	8.37063	0	6.57854	7.43802	3.54004
O	11.91659	2.97630	8.38046	0	6.57414	10.41635	3.54360
O				0	-0.02999	1.48612	6.17301

This journal is © The Owner Societies 2010

O	-0.02913	4.46415	6.17491		Ti	9.82711	0.00007	8.39416
O	-0.02999	7.44218	6.17301		Ti	9.84960	2.97405	8.39325
O	-0.02962	10.41635	6.17188		Ti	9.84960	5.95425	8.39325
O	6.55343	1.48784	6.14642		Ti	9.82711	8.92823	8.39416
O	6.58248	4.46415	6.12131		Ti	13.13403	1.48485	8.03298
O	6.55343	7.44046	6.14642		Ti	-0.02355	4.46415	8.03519
O	6.56480	10.41635	6.12831		Ti	13.13403	7.44345	8.03298
O	1.28814	0.00000	1.64639		Ti	13.13336	10.41635	8.03079
O	1.28814	2.97610	1.64639		Ti	6.54537	1.51544	7.99974
O	1.28814	5.95220	1.64639		Ti	6.57956	4.46415	8.73875
O	1.28814	8.92830	1.64639		Ti	6.54537	7.41286	7.99974
O	7.87371	0.00000	1.64639		Ti	6.55339	10.41635	7.97731
O	7.87371	2.97610	1.64639		Ti	0.06265	0.00030	4.85158
O	7.87371	5.95220	1.64639		Ti	0.04188	2.97642	4.85207
O	7.87371	8.92830	1.64639		Ti	0.04188	5.95188	4.85207
O	5.29743	0.00000	1.64639		Ti	0.06265	8.92800	4.85158
O	5.29743	2.97610	1.64639		Ti	6.66055	0.02473	4.81104
O	5.29743	5.95220	1.64639		Ti	6.62679	3.04437	4.92773
O	5.29743	8.92830	1.64639		Ti	6.62679	5.88393	4.92773
O	11.88300	0.00000	1.64639		Ti	6.66055	8.90357	4.81104
O	11.88300	2.97610	1.64639		Ti	3.34290	1.48933	5.00611
O	11.88300	5.95220	1.64639		Ti	3.32026	4.46415	5.00564
O	11.88300	8.92830	1.64639		Ti	3.34290	7.43897	5.00611
O	3.26764	1.46575	2.99473		Ti	3.35591	10.41635	5.01338
O	3.26966	4.46415	3.00706		Ti	9.92333	1.49911	5.00221
O	3.26764	7.46255	2.99473		Ti	9.90019	4.46415	5.00795
O	3.26243	10.41635	2.98512		Ti	9.92333	7.42919	5.00221
O	9.90281	1.48207	2.99882		Ti	9.94956	10.41635	5.00459
O	9.89617	4.46415	3.00253		Ti	3.29278	0.00000	1.64639
O	9.90281	7.44623	2.99882		Ti	3.29278	2.97610	1.64639
O	9.85956	10.41635	3.00457		Ti	3.29278	5.95220	1.64639
O	3.29278	1.48805	0.35825		Ti	3.29278	8.92830	1.64639
O	3.29278	4.46415	0.35825		Ti	9.87835	0.00000	1.64639
O	3.29278	7.44025	0.35825		Ti	9.87835	2.97610	1.64639
O	3.29278	10.41635	0.35825		Ti	9.87835	5.95220	1.64639
O	9.87835	1.48805	0.35825		Ti	9.87835	8.92830	1.64639
O	9.87835	4.46415	0.35825		Ti	0.00000	1.48805	1.64639
O	9.87835	7.44025	0.35825		Ti	0.00000	4.46415	1.64639
O	9.87835	10.41635	0.35825		Ti	0.00000	7.44025	1.64639
Ti	3.27161	0.00233	8.39791		Ti	0.00000	10.41635	1.64639
Ti	3.27292	2.97855	8.39435		Ti	6.58557	1.48805	1.64639
Ti	3.27292	5.94975	8.39435		Ti	6.58557	4.46415	1.64639
Ti	3.27161	8.92597	8.39791		Ti	6.58557	7.44025	1.64639

This journal is © The Owner Societies 2010

Ti	6.58557	10.41635	1.64639			8.56211	2.96487	4.92726
Br	6.60387	4.46415	11.09726			8.56211	5.96343	4.92726
K	3.32690	10.41635	-2.06159			8.54184	8.92405	4.92308
TiO ₂ + Rb + Br								
O	1.18562	-0.00013	8.37464			4.60820	11.90327	4.92932
O	1.18831	2.97386	8.37609			4.59721	2.97153	4.93081
O	1.18831	5.95444	8.37609			4.59721	5.95677	4.93081
O	1.18562	8.92843	8.37464			4.60820	8.92943	4.92932
O	7.77111	0.00312	8.33131			11.20791	11.90018	4.93131
O	7.79032	2.94980	8.37396			11.21386	2.97812	4.93129
O	7.79032	5.97850	8.37396			11.21386	5.95018	4.93129
O	7.77111	8.92518	8.33131			11.20791	8.93252	4.93131
O	5.32406	11.90390	8.32174			-0.00453	1.48689	3.55369
O	5.32788	2.96762	8.38316			0.00886	4.46415	3.55596
O	5.32788	5.96068	8.38316			-0.00453	7.44141	3.55369
O	5.32406	8.92880	8.32174			-0.01564	10.41635	3.55371
O	11.90993	11.90251	8.37217			6.57831	1.49076	3.54010
O	11.91793	2.97599	8.38159			6.58367	4.46415	3.54430
O	11.91793	5.95231	8.38159			6.57831	7.43754	3.54010
O	11.90993	8.93019	8.37217			6.57381	10.41635	3.54383
O	3.26011	1.48688	9.49010			-0.03083	1.48611	6.17350
O	3.25470	4.46415	9.48927			-0.02895	4.46415	6.17578
O	3.26011	7.44142	9.49010			-0.03083	7.44219	6.17350
O	3.26364	10.41635	9.48969			-0.03024	10.41635	6.17278
O	9.84767	1.48537	9.48904			6.55479	1.48796	6.14688
O	9.84517	4.46415	9.48558			6.58233	4.46415	6.12099
O	9.84767	7.44293	9.48904			6.55479	7.44034	6.14688
O	9.83644	10.41635	9.48841			6.56621	10.41635	6.12805
O	3.25484	1.48760	6.92112			1.28814	0.00000	1.64639
O	3.25128	4.46415	6.92531			1.28814	2.97610	1.64639
O	3.25484	7.44070	6.92112			1.28814	5.95220	1.64639
O	3.25091	10.41635	6.91870			1.28814	8.92830	1.64639
O	9.87213	1.48521	6.91930			7.87371	0.00000	1.64639
O	9.87570	4.46415	6.92192			7.87371	2.97610	1.64639
O	9.87213	7.44309	6.91930			7.87371	5.95220	1.64639
O	9.84905	10.41635	6.91859			7.87371	8.92830	1.64639
O	1.94081	11.90119	4.93240			5.29743	0.00000	1.64639
O	1.94006	2.97356	4.93669			5.29743	2.97610	1.64639
O	1.94006	5.95474	4.93669			5.29743	5.95220	1.64639
O	1.94081	8.93151	4.93240			5.29743	8.92830	1.64639
O	8.54184	0.00425	4.92308			11.88300	0.00000	1.64639
						11.88300	2.97610	1.64639
						11.88300	5.95220	1.64639
						11.88300	8.92830	1.64639

O	3.26687	1.46817	2.99623	Ti	3.35652	10.41635	5.01190
O	3.26838	4.46415	3.00702	Ti	9.92345	1.49937	5.00215
O	3.26687	7.46013	2.99623	Ti	9.89975	4.46415	5.00770
O	3.26333	10.41635	2.98911	Ti	9.92345	7.42893	5.00215
O	9.90211	1.48254	2.99919	Ti	9.94994	10.41635	5.00406
O	9.89529	4.46415	3.00267	Ti	3.29278	0.00000	1.64639
O	9.90211	7.44576	2.99919	Ti	3.29278	2.97610	1.64639
O	9.85782	10.41635	3.00407	Ti	3.29278	5.95220	1.64639
O	3.29278	1.48805	0.35825	Ti	3.29278	8.92830	1.64639
O	3.29278	4.46415	0.35825	Ti	9.87835	0.00000	1.64639
O	3.29278	7.44025	0.35825	Ti	9.87835	2.97610	1.64639
O	3.29278	10.41635	0.35825	Ti	9.87835	5.95220	1.64639
O	9.87835	1.48805	0.35825	Ti	9.87835	8.92830	1.64639
O	9.87835	4.46415	0.35825	Ti	0.00000	1.48805	1.64639
O	9.87835	7.44025	0.35825	Ti	0.00000	4.46415	1.64639
O	9.87835	10.41635	0.35825	Ti	0.00000	7.44025	1.64639
Ti	3.27277	0.00189	8.39704	Ti	0.00000	10.41635	1.64639
Ti	3.27318	2.97791	8.39397	Ti	6.58557	1.48805	1.64639
Ti	3.27318	5.95039	8.39397	Ti	6.58557	4.46415	1.64639
Ti	3.27277	8.92641	8.39704	Ti	6.58557	7.44025	1.64639
Ti	9.82878	0.00018	8.39382	Ti	6.58557	10.41635	1.64639
Ti	9.85107	2.97412	8.39328	Br	6.59871	4.46415	11.09633
Ti	9.85107	5.95418	8.39328	Rb	3.32972	10.41635	-2.22398
Ti	9.82878	8.92812	8.39382	TiO2 + Cs + Br			
Ti	13.13558	1.48470	8.03272	O	1.18681	0.00002	8.37422
Ti	-0.02294	4.46415	8.03474	O	1.18964	2.97265	8.37849
Ti	13.13558	7.44360	8.03272	O	1.18964	5.95565	8.37849
Ti	13.13447	10.41635	8.03115	O	1.18681	8.92828	8.37422
Ti	6.54637	1.51484	8.00000	O	7.77154	0.00278	8.32947
Ti	6.57939	4.46415	8.73668	O	7.79082	2.94865	8.36791
Ti	6.54637	7.41346	8.00000	O	7.79082	5.97965	8.36791
Ti	6.55521	10.41635	7.97544	O	7.77154	8.92552	8.32947
Ti	0.06237	0.00004	4.85186	O	5.32459	11.90355	8.32067
Ti	0.04161	2.97636	4.85205	O	5.32743	2.96755	8.38028
Ti	0.04161	5.95194	4.85205	O	5.32743	5.96075	8.38028
Ti	0.06237	8.92826	4.85186	O	5.32459	8.92915	8.32067
Ti	6.66088	0.02541	4.81034	O	11.91096	11.90197	8.37344
Ti	6.62613	3.04386	4.92812	O	11.91907	2.97632	8.38277
Ti	6.62613	5.88444	4.92812	O	11.91907	5.95198	8.38277
Ti	6.66088	8.90289	4.81034	O	11.91096	8.93073	8.37344
Ti	3.34300	1.48945	5.00544	O	3.26146	1.48685	9.48988
Ti	3.31878	4.46415	5.00584	O	3.25526	4.46415	9.48966
Ti	3.34300	7.43885	5.00544				

0	3.26146	7.44145	9.48988	0	6.57920	4.46415	6.12134
0	3.26479	10.41635	9.48937	0	6.55517	7.44092	6.14438
0	9.84749	1.48562	9.48791	0	6.56521	10.41635	6.12705
0	9.84179	4.46415	9.48354	0	1.28814	0.00000	1.64639
0	9.84749	7.44268	9.48791	0	1.28814	2.97610	1.64639
0	9.83574	10.41635	9.48729	0	1.28814	5.95220	1.64639
0	3.25515	1.48699	6.92086	0	1.28814	8.92830	1.64639
0	3.25031	4.46415	6.92552	0	7.87371	0.00000	1.64639
0	3.25515	7.44131	6.92086	0	7.87371	2.97610	1.64639
0	3.25126	10.41635	6.91779	0	7.87371	5.95220	1.64639
0	9.87481	1.48458	6.91858	0	7.87371	8.92830	1.64639
0	9.87890	4.46415	6.92043	0	5.29743	0.00000	1.64639
0	9.87481	7.44372	6.91858	0	5.29743	2.97610	1.64639
0	9.84992	10.41635	6.91805	0	5.29743	5.95220	1.64639
0	1.94093	11.90088	4.93168	0	5.29743	8.92830	1.64639
0	1.94084	2.97237	4.93496	0	11.88300	0.00000	1.64639
0	1.94084	5.95593	4.93496	0	11.88300	2.97610	1.64639
0	1.94093	8.93182	4.93168	0	11.88300	5.95220	1.64639
0	8.54161	0.00410	4.92216	0	11.88300	8.92830	1.64639
0	8.56173	2.96563	4.92698	0	3.27040	1.46201	2.99377
0	8.56173	5.96267	4.92698	0	3.26841	4.46415	3.00687
0	8.54161	8.92420	4.92216	0	3.27040	7.46629	2.99377
0	4.60798	11.90223	4.92847	0	3.26243	10.41635	2.98319
0	4.59622	2.97123	4.92977	0	9.90310	1.48327	2.99906
0	4.59622	5.95707	4.92977	0	9.89662	4.46415	3.00238
0	4.60798	8.93047	4.92847	0	9.90310	7.44503	2.99906
0	11.20778	11.90043	4.93067	0	9.85696	10.41635	3.00379
0	11.21525	2.97841	4.93100	0	3.29278	1.48805	0.35825
0	11.21525	5.94989	4.93100	0	3.29278	4.46415	0.35825
0	11.20778	8.93227	4.93067	0	3.29278	7.44025	0.35825
0	-0.00277	1.48797	3.55394	0	3.29278	10.41635	0.35825
0	0.01164	4.46415	3.55801	0	9.87835	1.48805	0.35825
0	-0.00277	7.44033	3.55394	0	9.87835	4.46415	0.35825
0	-0.01658	10.41635	3.55465	0	9.87835	7.44025	0.35825
0	6.57727	1.49085	3.53982	0	9.87835	10.41635	0.35825
0	6.58216	4.46415	3.54420	Ti	3.27331	0.00251	8.39802
0	6.57727	7.43745	3.53982	Ti	3.27531	2.97864	8.39430
0	6.57278	10.41635	3.54319	Ti	3.27531	5.94966	8.39430
0	-0.03017	1.48597	6.17428	Ti	3.27331	8.92579	8.39802
0	-0.02407	4.46415	6.17952	Ti	9.82914	0.00015	8.39335
0	-0.03017	7.44233	6.17428	Ti	9.85223	2.97404	8.39213
0	-0.03012	10.41635	6.17306	Ti	9.85223	5.95426	8.39213
0	6.55517	1.48738	6.14438	Ti	9.82914	8.92815	8.39335

Ti	13.13533	1.48438	8.03346	TiO ₂ + Pyridine		
Ti	-0.01916	4.46415	8.03845	O	1.22440	8.39170
Ti	13.13533	7.44392	8.03346	O	1.22309	2.97551
Ti	13.13589	10.41635	8.03133	O	1.22017	5.95206
Ti	6.54483	1.51475	7.99739	O	1.22248	8.92838
Ti	6.58378	4.46415	8.73113	O	7.81880	11.89918
Ti	6.54483	7.41355	7.99739	O	7.81970	2.94001
Ti	6.55700	10.41635	7.97459	O	7.81838	5.98548
Ti	0.06048	0.00045	4.85140	O	7.79709	8.93556
Ti	0.03663	2.97703	4.85306	O	5.37442	11.89601
Ti	0.03663	5.95127	4.85306	O	5.35384	2.94264
Ti	0.06048	8.92785	4.85140	O	5.35261	5.98723
Ti	6.65806	0.02482	4.80929	O	5.35268	8.93212
Ti	6.62154	3.04417	4.92675	O	11.94941	11.90351
Ti	6.62154	5.88413	4.92675	O	11.95182	2.97640
Ti	6.65806	8.90348	4.80929	O	11.94865	5.95238
Ti	3.34066	1.48994	5.00689	O	11.94728	8.92806
Ti	3.31290	4.46415	5.00539	O	3.31127	1.49010
Ti	3.34066	7.43836	5.00689	O	3.32795	4.46349
Ti	3.35525	10.41635	5.01423	O	3.31489	7.44106
Ti	9.92123	1.49905	5.00142	O	3.30173	10.41306
Ti	9.89513	4.46415	5.00723	O	9.85762	1.48697
Ti	9.92123	7.42925	5.00142	O	9.84388	4.46465
Ti	9.94834	10.41635	5.00340	O	9.86270	7.43743
Ti	3.29278	0.00000	1.64639	O	9.87154	10.41947
Ti	3.29278	2.97610	1.64639	O	3.27379	1.48063
Ti	3.29278	5.95220	1.64639	O	3.26087	4.46440
Ti	3.29278	8.92830	1.64639	O	3.25783	7.44063
Ti	9.87835	0.00000	1.64639	O	3.28571	10.42683
Ti	9.87835	2.97610	1.64639	O	9.91262	1.48599
Ti	9.87835	5.95220	1.64639	O	9.90978	4.46361
Ti	9.87835	8.92830	1.64639	O	9.89257	7.45076
Ti	0.00000	1.48805	1.64639	O	9.88006	10.40570
Ti	0.00000	4.46415	1.64639	O	1.94433	11.90329
Ti	0.00000	7.44025	1.64639	O	1.94463	2.97545
Ti	0.00000	10.41635	1.64639	O	1.94845	5.95018
Ti	6.58557	1.48805	1.64639	O	1.95047	8.93554
Ti	6.58557	4.46415	1.64639	O	8.54082	0.00123
Ti	6.58557	7.44025	1.64639	O	8.55028	2.96458
Ti	6.58557	10.41635	1.64639	O	8.55775	5.95340
Br	6.60576	4.46415	11.08908	O	8.54333	8.92745
Cs	3.35494	10.41635	-2.07719	O	4.62267	0.00155
				O	4.61539	2.97638

O	4.62318	5.95631	4.94401	O	9.88247	4.46254	3.01815
O	4.62474	8.92523	4.93280	O	9.88836	7.44133	3.01568
O	11.21541	11.89655	4.94414	O	9.87936	10.41529	3.01643
O	11.21903	2.97518	4.94149	O	3.29278	1.48805	0.35825
O	11.22239	5.95507	4.94279	O	3.29278	4.46415	0.35825
O	11.22153	8.92800	4.94165	O	3.29278	7.44025	0.35825
O	13.14664	1.48616	3.57251	O	3.29278	10.41635	0.35825
O	13.14778	4.46501	3.57185	O	9.87835	1.48805	0.35825
O	0.02260	7.44235	3.57217	O	9.87835	4.46415	0.35825
O	13.14777	10.41618	3.57164	O	9.87835	7.44025	0.35825
O	6.58428	1.50997	3.55607	O	9.87835	10.41635	0.35825
O	6.60918	4.46310	3.57891	Ti	3.29998	11.90194	8.39671
O	6.58489	7.41761	3.55601	Ti	3.28444	2.97343	8.38552
O	6.58150	10.41655	3.54661	Ti	3.28123	5.95483	8.38673
O	13.16691	1.48806	6.19353	Ti	3.29341	8.92783	8.38994
O	13.17083	4.46402	6.19373	Ti	9.87818	0.00013	8.39055
O	13.17034	7.44055	6.19368	Ti	9.89191	2.97295	8.38752
O	13.17030	10.41660	6.19483	Ti	9.88805	5.95421	8.38594
O	6.56352	1.47339	6.14280	Ti	9.87105	8.92984	8.39761
O	6.58609	4.46372	6.20932	Ti	0.00234	1.48357	8.04496
O	6.60362	7.45467	6.14156	Ti	0.00136	4.46417	8.04400
O	6.58146	10.41551	6.13291	Ti	13.16849	7.44468	8.04518
O	1.28814	0.00000	1.64639	Ti	0.00069	10.41627	8.04701
O	1.28814	2.97610	1.64639	Ti	6.58990	1.47775	7.98090
O	1.28814	5.95220	1.64639	Ti	6.58692	4.46341	8.28461
O	1.28814	8.92830	1.64639	Ti	6.58185	7.44947	7.98019
O	7.87371	0.00000	1.64639	Ti	6.58578	10.41575	7.97980
O	7.87371	2.97610	1.64639	Ti	0.01638	11.90390	4.85780
O	7.87371	5.95220	1.64639	Ti	0.00757	2.97558	4.85497
O	7.87371	8.92830	1.64639	Ti	0.01878	5.95359	4.85613
O	5.29743	0.00000	1.64639	Ti	0.01322	8.92953	4.85754
O	5.29743	2.97610	1.64639	Ti	6.59899	0.01571	4.80214
O	5.29743	5.95220	1.64639	Ti	6.60215	3.02275	4.91215
O	5.29743	8.92830	1.64639	Ti	6.59989	5.90470	4.91150
O	11.88300	0.00000	1.64639	Ti	6.61115	8.91228	4.80154
O	11.88300	2.97610	1.64639	Ti	3.30734	1.49015	4.99365
O	11.88300	5.95220	1.64639	Ti	3.29936	4.46268	4.99645
O	11.88300	8.92830	1.64639	Ti	3.31012	7.44225	4.99341
O	3.27941	1.48770	3.01581	Ti	3.30623	10.41395	4.99595
O	3.28696	4.46538	3.01780	Ti	9.88971	1.48595	4.99502
O	3.27994	7.44009	3.01687	Ti	9.89500	4.46339	4.99656
O	3.28697	10.41730	3.01659	Ti	9.89207	7.43360	4.99512
O	9.88839	1.48709	3.01624	Ti	9.89881	10.41628	4.99658

This journal is © The Owner Societies 2010

Ti	3.29278	0.00000	1.64639	O	11.96314	5.95493	8.38365
Ti	3.29278	2.97610	1.64639	O	11.96479	8.92673	8.38238
Ti	3.29278	5.95220	1.64639	O	3.33677	1.49430	9.47936
Ti	3.29278	8.92830	1.64639	O	3.33866	4.45953	9.47096
Ti	9.87835	0.00000	1.64639	O	3.32400	7.44040	9.48545
Ti	9.87835	2.97610	1.64639	O	3.32373	10.41779	9.48548
Ti	9.87835	5.95220	1.64639	O	9.89482	1.48699	9.49317
Ti	9.87835	8.92830	1.64639	O	9.86086	4.46964	9.48844
Ti	0.00000	1.48805	1.64639	O	9.87308	7.43230	9.49456
Ti	0.00000	4.46415	1.64639	O	9.90136	10.41499	9.49384
Ti	0.00000	7.44025	1.64639	O	3.26417	1.48673	6.91652
Ti	0.00000	10.41635	1.64639	O	3.26102	4.46412	6.91625
Ti	6.58557	1.48805	1.64639	O	3.26267	7.44232	6.92004
Ti	6.58557	4.46415	1.64639	O	3.28294	10.42110	6.92014
Ti	6.58557	7.44025	1.64639	O	9.91293	1.48348	6.93110
Ti	6.58557	10.41635	1.64639	O	9.91710	4.46417	6.93115
C	6.70451	5.60896	11.23812	O	9.90895	7.44578	6.92948
C	6.47305	3.31423	11.23868	O	9.88994	10.40604	6.92828
C	6.69894	5.65290	12.62387	O	1.97448	-0.00131	4.92554
C	6.47715	3.27226	12.62451	O	1.97211	2.97663	4.92364
C	6.58826	4.46287	13.33395	O	1.97211	5.95244	4.92408
H	6.81954	6.51717	10.66907	O	1.97460	8.93229	4.92603
H	6.36068	2.40515	10.67073	O	8.57520	0.00084	4.92945
H	6.78870	6.60461	13.12553	O	8.58539	2.97150	4.94927
H	6.38759	2.32100	13.12743	O	8.58444	5.95646	4.94776
H	6.59044	4.46268	14.41508	O	8.57360	8.92596	4.92740
N	6.58895	4.46146	10.54216	O	4.65022	0.00191	4.94232
TiO2 + Pyrimidine				O	4.64654	2.97507	4.95651
O	1.23845	0.00232	8.39126	O	4.64592	5.95459	4.95775
O	1.23024	2.97672	8.39289	O	4.64916	8.92691	4.94319
O	1.23089	5.95089	8.39457	O	11.23872	11.90088	4.95797
O	1.23783	8.92872	8.39098	O	11.23994	2.97686	4.95247
O	7.83508	11.89355	8.35048	O	11.23988	5.95281	4.95278
O	7.83612	2.94318	8.34462	O	11.23941	8.92944	4.95377
O	7.82714	5.98450	8.34954	O	13.15439	1.48626	3.56816
O	7.81470	8.93115	8.38482	O	13.15527	4.46607	3.56690
O	5.38204	-0.00451	8.31980	O	13.15624	7.44402	3.56706
O	5.36425	2.94258	8.30465	O	13.15548	10.41895	3.56729
O	5.35663	5.98624	8.30372	O	6.60930	1.50619	3.56104
O	5.36711	8.93555	8.30862	O	6.61733	4.46420	3.57970
O	11.96699	-0.00265	8.37878	O	6.60686	7.42090	3.56023
O	11.96442	2.97783	8.38589	O	6.60684	10.41690	3.55218
				O	0.03126	1.48927	6.18465

O	0.03083	4.46511	6.18387	Ti	9.89230	-0.00120	8.39695
O	0.03237	7.44150	6.18382	Ti	9.89706	2.97395	8.39419
O	0.03264	10.41627	6.18555	Ti	9.90325	5.95364	8.37517
O	6.62244	1.47647	6.15085	Ti	9.88447	8.92834	8.40012
O	6.61953	4.46430	6.20925	Ti	0.01119	1.48226	8.03757
O	6.62238	7.45278	6.15070	Ti	0.00726	4.46637	8.03561
O	6.62310	10.41473	6.14046	Ti	0.01723	7.44658	8.03738
O	1.28814	0.00000	1.64639	Ti	0.01977	10.41556	8.04008
O	1.28814	2.97610	1.64639	Ti	6.62009	1.47661	7.99131
O	1.28814	5.95220	1.64639	Ti	6.57872	4.45762	8.28160
O	1.28814	8.92830	1.64639	Ti	6.59799	7.44689	7.99132
O	7.87371	0.00000	1.64639	Ti	6.60284	10.41447	7.98534
O	7.87371	2.97610	1.64639	Ti	0.09240	0.00017	4.85300
O	7.87371	5.95220	1.64639	Ti	0.08510	2.97630	4.84876
O	7.87371	8.92830	1.64639	Ti	0.08264	5.95460	4.84994
O	5.29743	0.00000	1.64639	Ti	0.08897	8.93071	4.85104
O	5.29743	2.97610	1.64639	Ti	6.69320	0.01557	4.80893
O	5.29743	5.95220	1.64639	Ti	6.67600	3.02195	4.91394
O	5.29743	8.92830	1.64639	Ti	6.67473	5.90686	4.91475
O	11.88300	0.00000	1.64639	Ti	6.69132	8.91237	4.80730
O	11.88300	2.97610	1.64639	Ti	3.37922	1.48651	4.98766
O	11.88300	5.95220	1.64639	Ti	3.36538	4.46539	4.99169
O	11.88300	8.92830	1.64639	Ti	3.37446	7.44186	4.99295
O	3.29237	1.48947	3.01765	Ti	3.38186	10.41557	4.99429
O	3.29772	4.46409	3.01876	Ti	9.96242	1.49411	4.99904
O	3.29269	7.43954	3.01790	Ti	9.95392	4.46393	4.99731
O	3.29680	10.41743	3.01728	Ti	9.95909	7.43532	4.99486
O	9.89497	1.48668	3.01789	Ti	9.97310	10.41690	5.00058
O	9.88801	4.46421	3.01918	Ti	3.29278	0.00000	1.64639
O	9.89418	7.44104	3.01727	Ti	3.29278	2.97610	1.64639
O	9.88584	10.41552	3.01834	Ti	3.29278	5.95220	1.64639
O	3.29278	1.48805	0.35825	Ti	3.29278	8.92830	1.64639
O	3.29278	4.46415	0.35825	Ti	9.87835	0.00000	1.64639
O	3.29278	7.44025	0.35825	Ti	9.87835	2.97610	1.64639
O	3.29278	10.41635	0.35825	Ti	9.87835	5.95220	1.64639
O	9.87835	1.48805	0.35825	Ti	9.87835	8.92830	1.64639
O	9.87835	4.46415	0.35825	Ti	0.00000	1.48805	1.64639
O	9.87835	7.44025	0.35825	Ti	0.00000	4.46415	1.64639
O	9.87835	10.41635	0.35825	Ti	0.00000	7.44025	1.64639
Ti	3.31165	11.90257	8.38832	Ti	0.00000	10.41635	1.64639
Ti	3.27121	2.97210	8.36061	Ti	6.58557	1.48805	1.64639
Ti	3.28922	5.95780	8.38175	Ti	6.58557	4.46415	1.64639
Ti	3.30881	8.92996	8.38799	Ti	6.58557	7.44025	1.64639

This journal is © The Owner Societies 2010

Ti	6.58557	10.41635	1.64639					9.86432	4.46457	6.92065
C	7.18171	5.39871	11.24803					9.85046	7.44469	6.92127
C	5.75522	3.58891	11.23196					9.83780	10.41519	6.92610
C	7.08212	5.45484	12.62875					1.97373	-0.00128	4.93029
C	6.28728	4.49946	13.25000					1.97238	2.97672	4.92941
H	7.80979	6.08467	10.69941					1.97343	5.95178	4.92941
H	5.20451	2.85214	10.66697					1.97483	8.93138	4.93058
H	7.61682	6.20701	13.18830					8.56571	0.00020	4.91881
H	6.16936	4.47403	14.32673					8.57440	2.97377	4.93383
N	5.63200	3.56089	12.55360					8.57487	5.95617	4.93472
N	6.50897	4.47203	10.53366					8.56600	8.92852	4.91805
								4.64440	0.00249	4.95231
								4.64170	2.97443	4.97541
								4.64156	5.95493	4.97651
								4.64429	8.92821	4.95147
								11.23499	-0.00163	4.95765
								11.23622	2.97505	4.95232
								11.23706	5.95345	4.95215
								11.23574	8.93065	4.95662
								0.02452	1.48599	3.56978
								0.02449	4.46346	3.56923
								0.02482	7.44116	3.56947
								0.02424	10.41629	3.56919
								6.59364	1.51070	3.55973
								6.61185	4.46604	3.57959
								6.59425	7.41827	3.55964
								6.59129	10.41814	3.54944
								0.01975	1.48794	6.18592
								0.01942	4.46364	6.18543
								0.02402	7.44021	6.18413
								0.02204	10.41607	6.18617
								6.61743	1.47523	6.15101
								6.60846	4.46464	6.21058
								6.61548	7.45645	6.15098
								6.61346	10.41653	6.14111
								1.28814	0.00000	1.64639
								1.28814	2.97610	1.64639
								1.28814	5.95220	1.64639
								1.28814	8.92830	1.64639
								7.87371	0.00000	1.64639
								7.87371	2.97610	1.64639
								7.87371	5.95220	1.64639
								7.87371	8.92830	1.64639

TiO₂ + Pyrazine

O	1.18175	0.00196	8.39721							
O	1.17843	2.97633	8.39650							
O	1.17956	5.95068	8.39776							
O	1.18217	8.92922	8.39468							
O	7.76778	11.89774	8.37379							
O	7.77763	2.94782	8.35107							
O	7.77406	5.97820	8.35229							
O	7.76551	8.93309	8.37570							
O	5.32128	-0.00338	8.31804							
O	5.31146	2.93902	8.30191							
O	5.30814	5.99258	8.30167							
O	5.31892	8.93362	8.31887							
O	11.90487	-0.00166	8.36055							
O	11.90686	2.97656	8.36784							
O	11.90730	5.95593	8.36310							
O	11.90573	8.92733	8.36186							
O	3.28608	1.49872	9.48761							
O	3.28968	4.45892	9.47888							
O	3.26202	7.44107	9.48919							
O	3.26340	10.41924	9.48929							
O	9.84057	1.48895	9.48824							
O	9.82394	4.46930	9.47956							
O	9.82775	7.43512	9.48723							
O	9.84208	10.41555	9.49082							
O	3.23740	1.48561	6.92264							
O	3.23768	4.46396	6.92294							
O	3.24056	7.44277	6.92573							
O	3.24916	10.41802	6.92606							
O	9.84796	1.48408	6.92388							

O	5.29743	0.00000	1.64639	Ti	0.09623	8.92867	4.85319
O	5.29743	2.97610	1.64639	Ti	6.68631	0.01723	4.80837
O	5.29743	5.95220	1.64639	Ti	6.67331	3.02192	4.91240
O	5.29743	8.92830	1.64639	Ti	6.67596	5.90935	4.91392
O	11.88300	0.00000	1.64639	Ti	6.68819	8.91379	4.80619
O	11.88300	2.97610	1.64639	Ti	3.37366	1.48824	4.99299
O	11.88300	5.95220	1.64639	Ti	3.36785	4.46623	4.99658
O	11.88300	8.92830	1.64639	Ti	3.37537	7.44255	4.99784
O	3.29216	1.48979	3.02022	Ti	3.37857	10.41746	4.99865
O	3.29895	4.46375	3.02199	Ti	9.95356	1.49365	4.99583
O	3.29211	7.43874	3.02043	Ti	9.95178	4.46367	4.99327
O	3.29422	10.41735	3.01959	Ti	9.95680	7.43583	4.99163
O	9.89175	1.48678	3.01682	Ti	9.96614	10.41729	4.99871
O	9.88862	4.46478	3.01734	Ti	3.29278	0.00000	1.64639
O	9.89178	7.44150	3.01677	Ti	3.29278	2.97610	1.64639
O	9.88588	10.41613	3.01846	Ti	3.29278	5.95220	1.64639
O	3.29278	1.48805	0.35825	Ti	3.29278	8.92830	1.64639
O	3.29278	4.46415	0.35825	Ti	9.87835	0.00000	1.64639
O	3.29278	7.44025	0.35825	Ti	9.87835	2.97610	1.64639
O	3.29278	10.41635	0.35825	Ti	9.87835	5.95220	1.64639
O	9.87835	1.48805	0.35825	Ti	9.87835	8.92830	1.64639
O	9.87835	4.46415	0.35825	Ti	0.00000	1.48805	1.64639
O	9.87835	7.44025	0.35825	Ti	0.00000	4.46415	1.64639
O	9.87835	10.41635	0.35825	Ti	0.00000	7.44025	1.64639
Ti	3.26171	0.00200	8.39314	Ti	0.00000	10.41635	1.64639
Ti	3.22431	2.97599	8.36352	Ti	6.58557	1.48805	1.64639
Ti	3.24466	5.95931	8.38731	Ti	6.58557	4.46415	1.64639
Ti	3.26206	8.93190	8.39163	Ti	6.58557	7.44025	1.64639
Ti	9.83239	-0.00108	8.39416	Ti	6.58557	10.41635	1.64639
Ti	9.83936	2.97359	8.38729	C	7.19380	5.35159	11.25000
Ti	9.85435	5.95495	8.36834	C	5.74046	3.57271	11.23244
Ti	9.83395	8.93086	8.39424	C	7.14860	5.35482	12.64065
Ti	13.12953	1.48189	8.03644	C	5.72992	3.58502	12.62401
Ti	13.12893	4.46531	8.03439	H	7.81159	6.05098	10.70890
Ti	13.14229	7.44672	8.03547	H	5.14237	2.86571	10.67890
Ti	13.13786	10.41634	8.03816	H	7.71826	6.08731	13.19807
Ti	6.56573	1.48024	7.99174	H	5.13437	2.86063	13.16516
Ti	6.52567	4.46270	8.26943	N	6.48101	4.45796	10.53765
Ti	6.55657	7.44912	7.99112	N	6.42450	4.47458	13.34111
Ti	6.54852	10.41668	7.98587				
Ti	0.09496	-0.00137	4.85415				
Ti	0.09010	2.97437	4.85154				
Ti	0.09129	5.95238	4.85149				
				TiO2 + Pyrazole			
				O	1.26973	-0.00051	8.33342

O	1.26474	2.97315	8.36258	O	11.19629	-0.00275	4.92768
O	1.26568	5.95350	8.36419	O	11.19838	2.97640	4.92660
O	1.26988	8.92967	8.33498	O	11.19837	5.95143	4.92680
O	7.85289	11.90138	8.31957	O	11.19630	8.93019	4.92848
O	7.86782	2.94707	8.31331	O	-0.02373	1.48640	3.56553
O	7.86466	5.97950	8.33273	O	-0.02391	4.46384	3.56597
O	7.85338	8.93171	8.31980	O	-0.02343	7.44138	3.56568
O	5.40561	11.89967	8.37750	O	-0.02256	10.41599	3.56511
O	5.39029	2.95120	8.35469	O	6.57386	1.50889	3.55979
O	5.38804	5.97853	8.34578	O	6.55872	4.46379	3.58130
O	5.40556	8.93189	8.37789	O	6.57353	7.41895	3.56025
O	11.99226	-0.00024	8.39279	O	6.57738	10.41529	3.55051
O	11.99581	2.97658	8.38919	O	13.14322	1.48802	6.17712
O	11.99609	5.95193	8.38964	O	13.14908	4.46393	6.18054
O	11.99297	8.92785	8.39202	O	13.14397	7.43942	6.17813
O	3.33005	1.49284	9.48443	O	13.14226	10.41604	6.17633
O	3.35617	4.46090	9.48486	O	6.55423	1.47394	6.15960
O	3.33003	7.43521	9.48471	O	6.56191	4.46393	6.20913
O	3.32324	10.41600	9.49213	O	6.55549	7.45325	6.16088
O	9.91259	1.49095	9.48551	O	6.55792	10.41624	6.14242
O	9.92134	4.46503	9.47142	O	1.28814	0.00000	1.64639
O	9.91384	7.43830	9.48610	O	1.28814	2.97610	1.64639
O	9.91103	10.41691	9.48909	O	1.28814	5.95220	1.64639
O	3.32570	1.48820	6.92422	O	1.28814	8.92830	1.64639
O	3.28963	4.46354	6.91962	O	7.87371	0.00000	1.64639
O	3.32428	7.44002	6.92483	O	7.87371	2.97610	1.64639
O	3.33823	10.41622	6.92925	O	7.87371	5.95220	1.64639
O	9.93313	1.48584	6.92280	O	7.87371	8.92830	1.64639
O	9.93161	4.46479	6.91916	O	5.29743	0.00000	1.64639
O	9.93104	7.44091	6.92347	O	5.29743	2.97610	1.64639
O	9.92361	10.41604	6.92521	O	5.29743	5.95220	1.64639
O	1.93573	-0.00295	4.96077	O	5.29743	8.92830	1.64639
O	1.93295	2.97206	4.95114	O	11.88300	0.00000	1.64639
O	1.93277	5.95525	4.95076	O	11.88300	2.97610	1.64639
O	1.93517	8.93045	4.96033	O	11.88300	5.95220	1.64639
O	8.52671	0.00091	4.95152	O	11.88300	8.92830	1.64639
O	8.53028	2.97082	4.97224	O	3.27891	1.48590	3.01733
O	8.53026	5.95671	4.97205	O	3.27832	4.46406	3.01614
O	8.52704	8.92617	4.95165	O	3.27825	7.44266	3.01728
O	4.60384	0.00009	4.91998	O	3.28598	10.41644	3.02008
O	4.59124	2.97198	4.93669	O	9.88105	1.48862	3.01920
O	4.59128	5.95595	4.93658	O	9.87218	4.46411	3.01989
O	4.60403	8.92683	4.92077	O	9.88087	7.43935	3.01914

O	9.87757	10.41623	3.01900	Ti	3.29278	5.95220	1.64639
O	3.29278	1.48805	0.35825	Ti	3.29278	8.92830	1.64639
O	3.29278	4.46415	0.35825	Ti	9.87835	0.00000	1.64639
O	3.29278	7.44025	0.35825	Ti	9.87835	2.97610	1.64639
O	3.29278	10.41635	0.35825	Ti	9.87835	5.95220	1.64639
O	9.87835	1.48805	0.35825	Ti	9.87835	8.92830	1.64639
O	9.87835	4.46415	0.35825	Ti	0.00000	1.48805	1.64639
O	9.87835	7.44025	0.35825	Ti	0.00000	4.46415	1.64639
O	9.87835	10.41635	0.35825	Ti	0.00000	7.44025	1.64639
Ti	3.34423	11.89725	8.39163	Ti	0.00000	10.41635	1.64639
Ti	3.31578	2.95278	8.35488	Ti	6.58557	1.48805	1.64639
Ti	3.32040	5.97197	8.36056	Ti	6.58557	4.46415	1.64639
Ti	3.34478	8.93350	8.39027	Ti	6.58557	7.44025	1.64639
Ti	9.90835	-0.00232	8.39116	Ti	6.58557	10.41635	1.64639
Ti	9.93474	2.96572	8.37329	C	7.59251	4.52450	11.43942
Ti	9.93852	5.96430	8.37145	C	7.04946	4.46948	12.72300
Ti	9.90948	8.93119	8.39181	C	5.67436	4.37724	12.53817
Ti	0.03030	1.47960	8.02793	H	4.54394	4.36671	10.69322
Ti	0.04041	4.46396	8.02952	H	8.61702	4.59101	11.11617
Ti	0.03400	7.44817	8.02882	H	4.86535	4.31360	13.24320
Ti	0.03709	10.41626	8.02724	H	7.58182	4.49616	13.65460
Ti	6.61065	1.48763	8.00306	N	5.44135	4.37546	11.21497
Ti	6.64876	4.46466	8.36134	N	6.60386	4.46609	10.51974
Ti	6.61132	7.44103	8.00500				
Ti	6.62838	10.41646	7.98602				
Ti	13.07266	-0.00094	4.84913	TiO2 + Imidazole			
Ti	13.08268	2.97519	4.84815	O	1.26668	0.00170	8.36039
Ti	13.08350	5.95260	4.84835	O	1.26269	2.97238	8.36665
Ti	13.07440	8.92865	4.84962	O	1.26300	5.95216	8.36658
Ti	6.48368	0.01927	4.80687	O	1.26580	8.93098	8.36344
Ti	6.50056	3.02913	4.92991	O	7.85224	11.89956	8.31758
Ti	6.50118	5.89799	4.93032	O	7.86510	2.93493	8.29361
Ti	6.48385	8.90732	4.80844	O	7.85439	5.98065	8.33884
Ti	3.21696	1.49371	4.98218	O	7.85090	8.93194	8.31714
Ti	3.22585	4.46361	4.99345	O	5.40626	11.89874	8.37290
Ti	3.21801	7.43316	4.98377	O	5.39373	2.94555	8.35547
Ti	3.20489	10.41599	4.99622	O	5.38031	5.98059	8.30992
Ti	9.79610	1.48761	4.99287	O	5.40458	8.93086	8.37358
Ti	9.80695	4.46381	4.99997	O	11.98973	11.90373	8.39411
Ti	9.79684	7.44020	4.99144	O	11.99187	2.97683	8.39262
Ti	9.79094	10.41577	4.99796	O	11.99248	5.95258	8.39309
Ti	3.29278	0.00000	1.64639	O	11.98966	8.92723	8.39265
Ti	3.29278	2.97610	1.64639	O	3.34534	1.49419	9.49016

O	3.34442	4.45961	9.47638	O	6.55549	1.47509	6.14785
O	3.33380	7.43756	9.48601	O	6.56545	4.46306	6.20252
O	3.32868	10.41751	9.49165	O	6.56141	7.45597	6.15139
O	9.90868	1.48792	9.48706	O	6.55966	10.41613	6.13800
O	9.90221	4.46626	9.47783	O	1.28814	0.00000	1.64639
O	9.89815	7.43458	9.48880	O	1.28814	2.97610	1.64639
O	9.90851	10.41511	9.48841	O	1.28814	5.95220	1.64639
O	3.31951	1.48399	6.92185	O	1.28814	8.92830	1.64639
O	3.29645	4.46019	6.91853	O	7.87371	0.00000	1.64639
O	3.30410	7.45346	6.92131	O	7.87371	2.97610	1.64639
O	3.33365	10.41822	6.92660	O	7.87371	5.95220	1.64639
O	9.93225	1.48469	6.92203	O	7.87371	8.92830	1.64639
O	9.92852	4.46592	6.92123	O	5.29743	0.00000	1.64639
O	9.92784	7.44030	6.92298	O	5.29743	2.97610	1.64639
O	9.92270	10.41534	6.92430	O	5.29743	5.95220	1.64639
O	1.93602	11.90282	4.95506	O	5.29743	8.92830	1.64639
O	1.93376	2.97405	4.94905	O	11.88300	0.00000	1.64639
O	1.93389	5.95269	4.94940	O	11.88300	2.97610	1.64639
O	1.93506	8.93325	4.95288	O	11.88300	5.95220	1.64639
O	8.52808	0.00114	4.94911	O	11.88300	8.92830	1.64639
O	8.53128	2.97192	4.96141	O	3.27814	1.48663	3.01449
O	8.53080	5.95652	4.96219	O	3.28154	4.46397	3.01471
O	8.52878	8.92722	4.94760	O	3.27409	7.44289	3.01347
O	4.60521	0.00030	4.91775	O	3.28668	10.41732	3.01687
O	4.59375	2.97247	4.93332	O	9.88298	1.48833	3.01720
O	4.59233	5.95867	4.93664	O	9.87489	4.46474	3.01879
O	4.60478	8.92786	4.91849	O	9.88254	7.43932	3.01759
O	11.19793	11.90137	4.92858	O	9.87897	10.41590	3.01742
O	11.19848	2.97786	4.92829	O	3.29278	1.48805	0.35825
O	11.19885	5.95140	4.92862	O	3.29278	4.46415	0.35825
O	11.19801	8.92989	4.92954	O	3.29278	7.44025	0.35825
O	13.14710	1.48680	3.56719	O	3.29278	10.41635	0.35825
O	13.14708	4.46441	3.56713	O	9.87835	1.48805	0.35825
O	13.14690	7.44126	3.56768	O	9.87835	4.46415	0.35825
O	13.14728	10.41646	3.56693	O	9.87835	7.44025	0.35825
O	6.57553	1.50741	3.55521	O	9.87835	10.41635	0.35825
O	6.55756	4.46644	3.57670	Ti	3.34179	11.90130	8.39465
O	6.57438	7.42020	3.55648	Ti	3.31285	2.97179	8.36396
O	6.58118	10.41594	3.54816	Ti	3.32915	5.95419	8.38146
O	13.14718	1.48784	6.18150	Ti	3.33975	8.92881	8.39295
O	13.15068	4.46394	6.18292	Ti	9.90990	11.90243	8.38964
O	13.15014	7.44057	6.18309	Ti	9.92436	2.97106	8.38441
O	13.14919	10.41669	6.18391	Ti	9.93979	5.95446	8.37174

TiO₂ + 1,2,4-triazole

O	1.93781	2.96907	4.96232	O	11.88300	0.00000	1.64639
O	1.93537	5.95635	4.95742	O	11.88300	2.97610	1.64639
O	1.93586	8.92757	4.96206	O	11.88300	5.95220	1.64639
O	8.52752	0.00052	4.94971	O	11.88300	8.92830	1.64639
O	8.53142	2.97050	4.97059	O	3.27816	1.48501	3.02015
O	8.52994	5.95252	4.96871	O	3.27657	4.46333	3.01880
O	8.52688	8.92556	4.95168	O	3.27996	7.44180	3.01890
O	4.60397	-0.00190	4.91994	O	3.28298	10.41681	3.02166
O	4.59499	2.97222	4.93568	O	9.88118	1.48843	3.01893
O	4.59421	5.95386	4.93605	O	9.87339	4.46369	3.01933
O	4.60355	8.92600	4.92200	O	9.87978	7.43888	3.01978
O	11.19914	-0.00155	4.92583	O	9.87767	10.41580	3.01956
O	11.20523	2.97575	4.92038	O	3.29278	1.48805	0.35825
O	11.20072	5.94818	4.92460	O	3.29278	4.46415	0.35825
O	11.19518	8.92810	4.92886	O	3.29278	7.44025	0.35825
O	0.02031	1.48042	3.56792	O	3.29278	10.41635	0.35825
O	0.02106	4.46318	3.56767	O	9.87835	1.48805	0.35825
O	13.14744	7.43978	3.56782	O	9.87835	4.46415	0.35825
O	13.14851	10.41430	3.56778	O	9.87835	7.44025	0.35825
O	6.57367	1.50862	3.55997	O	9.87835	10.41635	0.35825
O	6.55863	4.46356	3.58081	Ti	3.34257	11.89545	8.39397
O	6.57237	7.41856	3.56178	Ti	3.31426	2.94926	8.35369
O	6.57571	10.41313	3.55118	Ti	3.31834	5.97093	8.36277
O	13.14326	1.48755	6.17937	Ti	3.34235	8.93240	8.39457
O	13.14900	4.46103	6.18092	Ti	9.90693	-0.00298	8.39047
O	-0.02445	7.43844	6.18153	Ti	9.93278	2.96568	8.37368
O	13.14420	10.41238	6.18069	Ti	9.93532	5.96191	8.37476
O	6.55479	1.47243	6.15580	Ti	9.90909	8.93044	8.39087
O	6.56262	4.46327	6.21121	Ti	0.02908	1.47914	8.02962
O	6.55597	7.45210	6.16141	Ti	0.03906	4.46270	8.02930
O	6.55756	10.41536	6.14366	Ti	0.03298	7.44663	8.03278
O	1.28814	0.00000	1.64639	Ti	0.03761	10.41511	8.03244
O	1.28814	2.97610	1.64639	Ti	6.60945	1.48337	7.99966
O	1.28814	5.95220	1.64639	Ti	6.64250	4.46239	8.30853
O	1.28814	8.92830	1.64639	Ti	6.61234	7.44148	8.00607
O	7.87371	0.00000	1.64639	Ti	6.62508	10.41493	7.98807
O	7.87371	2.97610	1.64639	Ti	13.07483	-0.00365	4.85287
O	7.87371	5.95220	1.64639	Ti	13.08770	2.97258	4.84552
O	7.87371	8.92830	1.64639	Ti	13.08332	5.95064	4.85021
O	5.29743	0.00000	1.64639	Ti	13.07014	8.92643	4.85091
O	5.29743	2.97610	1.64639	Ti	6.48242	0.01654	4.80771
O	5.29743	5.95220	1.64639	Ti	6.49831	3.02335	4.92201
O	5.29743	8.92830	1.64639	Ti	6.49653	5.90369	4.92142

This journal is © The Owner Societies 2010

Ti	6.48072	8.90863	4.81222
Ti	3.21642	1.49016	4.98312
Ti	3.22283	4.46194	4.99428
Ti	3.21404	7.43293	4.98503
Ti	3.20347	10.41347	4.99780
Ti	9.79720	1.48600	4.99186
Ti	9.80598	4.46187	4.99863
Ti	9.79350	7.43806	4.99173
Ti	9.78884	10.41447	4.99665
Ti	3.29278	0.00000	1.64639
Ti	3.29278	2.97610	1.64639
Ti	3.29278	5.95220	1.64639
Ti	3.29278	8.92830	1.64639
Ti	9.87835	0.00000	1.64639
Ti	9.87835	2.97610	1.64639
Ti	9.87835	5.95220	1.64639
Ti	9.87835	8.92830	1.64639
Ti	0.00000	1.48805	1.64639
Ti	0.00000	4.46415	1.64639
Ti	0.00000	7.44025	1.64639
Ti	0.00000	10.41635	1.64639
Ti	6.58557	1.48805	1.64639
Ti	6.58557	4.46415	1.64639
Ti	6.58557	7.44025	1.64639
Ti	6.58557	10.41635	1.64639
C	7.55039	4.44892	11.45103
C	5.73569	4.28449	12.51331
H	8.59320	4.51590	11.19210
H	4.52250	4.35086	10.69308
H	4.98866	4.19746	13.28199
N	5.43355	4.34114	11.20957
N	7.05712	4.35001	12.70059
N	6.59441	4.44673	10.50512