

Verification of dual cycle mechanism for methanol-to-olefins conversion in HSAPO-34: Methylbenzenes-based cycle from DFT calculations

Chuan-Ming Wang,* Yang-Dong Wang, Zai-Ku Xie*

Shanghai Research Institute of Petrochemical Technology, SINOPEC, Shanghai 201208, China

*Tel. : (+86)21-68462197; Fax: (+86)21-68462283

E-Mail: wangcm.sshy@sinopec.com, and xzk@sinopec.com

Supplementary Information:

The optimized geometries of the transition state structures in HMB-based, TMB-based, and PX-based side chain hydrocarbon pool mechanism are listed below in cif format.

TS1-2 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
_cell_length_b 13.8042
_cell_length_c 15.044
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05490	0.17974	0.52972	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09057	0.30376	0.51445	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28855	0.39638	0.82985	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14863	0.49178	0.79573	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26889	0.28226	0.07246	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17120	0.11933	0.28440	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05003	0.17694	0.73542	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15723	0.06880	0.19012	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15819	0.06970	0.39594	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08903	0.16554	0.62556	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26201	0.27670	0.85575	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35880	0.25996	0.82314	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24903	0.03668	0.17293	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48783	0.19420	0.13825	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05432	0.40720	0.52853	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15362	0.18886	0.80963	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25611	0.49839	0.07163	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38873	0.07328	0.19420	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.25206	0.39330	0.11121	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02437	0.29008	0.74460	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.42101	0.10169	0.30817	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11854	0.14904	0.46278	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07471	0.45341	0.64023	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37804	0.06827	0.40465	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29818	0.11108	0.43085	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40856	0.31962	0.09884	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04835	0.41220	0.73764	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48510	0.27671	0.86577	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.16912	0.15768	0.12180	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92738	0.61189	0.40071	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71422	0.50818	0.85309	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58477	0.93473	0.73371	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.72621	0.62208	0.82944	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96020	0.73110	0.16826	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81960	0.82253	0.12366	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56468	0.89699	0.62015	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.87118	0.87986	0.47413	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.88183	0.57973	0.28846	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.60208	0.94847	0.52602	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69032	0.92268	0.48752	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57453	0.70401	0.83233	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81086	0.84788	0.78961	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92754	0.60961	0.19226	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.49010	0.73513	0.06534	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.93364	0.83858	0.40527	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91320	0.71873	0.44683	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69873	0.61976	0.07283	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49905	0.90033	0.46483	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71385	0.73870	0.85759	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81250	0.92420	0.64043	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.83653	0.52566	0.12826	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81808	0.94996	0.74076	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92412	0.83468	0.19892	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82778	0.96081	0.52512	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87665	0.81786	0.30676	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84005	0.49270	0.46502	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48340	0.81923	0.79336	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72036	0.74110	0.06641	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61389	0.74012	0.09961	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72002	0.96784	0.76893	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81758	0.41102	0.61702	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48031	0.11923	0.46688	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65644	0.07724	0.53323	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82151	0.38908	0.51663	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70801	0.29041	0.48654	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58727	0.42043	0.85718	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51824	0.19242	0.80120	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.73185	0.51335	0.05618	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92568	0.10758	0.51863	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81458	0.38943	0.73233	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.91430	0.35996	0.49692	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59167	0.16666	0.74014	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56321	0.04597	0.75921	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59965	0.16633	0.53201	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92801	0.05474	0.76710	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77161	0.47812	0.77916	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49487	0.28338	0.07315	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.61308	0.38477	0.07994	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71789	0.24776	0.75861	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94595	0.41828	0.77182	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.56377	0.17878	0.64253	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.50542	0.78364	0.95427	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77087	0.51382	0.94350	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74533	0.78147	0.96855	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38768	0.84972	0.18825	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40961	0.96466	0.15539	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37676	0.85362	0.40104	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48370	0.73392	0.85917	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36870	0.62819	0.85307	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26364	0.76120	0.16942	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04201	0.96558	0.17554	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18281	0.52791	0.12894	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14773	0.51976	0.46288	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03006	0.59466	0.18069	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41348	0.85444	0.28875	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.18804	0.59292	0.30717	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31666	0.93923	0.41416	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16653	0.61813	0.40321	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27183	0.72275	0.43896	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.37960	0.59473	0.06977	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25222	0.49617	0.86526	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06827	0.92742	0.40007	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46697	0.82032	0.13816	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06691	0.63876	0.40564	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16552	0.62078	0.19684	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.24758	0.26139	0.95707	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47046	0.23365	0.97772	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.20652	0.47287	0.97634	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.86069	0.70417	0.55866	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.65353	0.60272	0.58548	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.82533	0.69327	0.61814	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.63467	0.65486	0.62691	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.65651	0.53369	0.61546	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.67628	0.62486	0.51714	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.84100	0.76768	0.63543	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.56642	0.37323	0.36222	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.50010	0.42453	0.50424	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.49974	0.33205	0.55585	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.46894	0.49464	0.55071	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.41261	0.45595	0.64067	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.46154	0.58027	0.50349	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.41991	0.64596	0.55409	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.49506	0.60033	0.41448	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.48500	0.68549	0.35928	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.53685	0.53725	0.37233	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.58432	0.56858	0.27988	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.53433	0.44565	0.41519	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.52059	0.34890	0.29945	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.54825	0.29762	0.39674	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.65546	0.41684	0.34588	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.42160	0.25319	0.54704	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.51031	0.34898	0.62676	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.56854	0.32214	0.53348	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.37615	0.50508	0.66351	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.46885	0.45936	0.69313	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.34513	0.36896	0.63636	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.43024	0.71786	0.51821	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.46427	0.67566	0.61708	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.33109	0.59458	0.57000	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.46113	0.65607	0.29129	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.56286	0.76584	0.35651	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.41961	0.69816	0.38578	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.64452	0.54143	0.26696	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.62663	0.65866	0.27012	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.51871	0.52991	0.22917	Biso	1.000	H

TS2-3 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04321	0.17349	0.52108	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.06456	0.28753	0.48507	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28807	0.39271	0.82841	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14262	0.48282	0.79130	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25844	0.27109	0.06558	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16229	0.10214	0.28286	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04979	0.17495	0.72741	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14975	0.05995	0.18589	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14560	0.05348	0.39499	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.09510	0.19064	0.61571	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25979	0.27126	0.85000	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35925	0.25707	0.82065	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24291	0.03172	0.16285	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48098	0.18580	0.13568	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.03591	0.39032	0.52415	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15617	0.18563	0.79765	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25500	0.49404	0.06627	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37985	0.06374	0.18962	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24081	0.38269	0.10083	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01148	0.27555	0.75817	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40304	0.08774	0.30465	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.10124	0.13138	0.45849	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.06925	0.42254	0.63745	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36519	0.05561	0.40229	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28515	0.09715	0.43142	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39744	0.30639	0.09219	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04077	0.39750	0.73711	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48623	0.27737	0.86400	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15951	0.15281	0.12285	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92224	0.60690	0.39650	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71132	0.50581	0.85603	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59295	0.94310	0.73692	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.72889	0.62014	0.82597	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95385	0.72204	0.15631	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81404	0.81802	0.12365	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56707	0.91893	0.62236	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85446	0.86793	0.46482	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.88479	0.58092	0.28318	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59645	0.95090	0.52336	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.67888	0.91472	0.48926	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57337	0.70053	0.83347	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81102	0.84509	0.79322	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92306	0.60233	0.18519	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48329	0.72697	0.06347	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92150	0.82500	0.40314	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.89236	0.70237	0.44764	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68914	0.61314	0.07900	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48702	0.89207	0.46977	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71206	0.73330	0.85758	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.79682	0.89375	0.63630	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82624	0.51379	0.12803	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81846	0.93907	0.73338	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92001	0.82488	0.19363	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.81489	0.94650	0.52398	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87419	0.80393	0.30182	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83706	0.47631	0.44686	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49168	0.82310	0.79203	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71426	0.73537	0.06779	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61057	0.74116	0.09863	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73035	0.97178	0.76112	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82957	0.44462	0.61214	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47104	0.11047	0.46061	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65291	0.07956	0.51327	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81259	0.38897	0.51906	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.68991	0.29620	0.50728	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58332	0.42323	0.86377	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.53356	0.20789	0.79571	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72244	0.50737	0.05818	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91452	0.09207	0.52678	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81432	0.39452	0.72270	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.89090	0.33911	0.50920	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59073	0.16310	0.73426	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57786	0.05506	0.77565	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58640	0.15874	0.53099	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93588	0.04064	0.74340	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.76388	0.46577	0.78562	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48736	0.27397	0.06958	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60346	0.37800	0.07888	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71726	0.24921	0.72394	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94119	0.41281	0.76377	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.53456	0.13853	0.64139	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.49299	0.77320	0.95230	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76853	0.51592	0.94681	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74083	0.77107	0.96921	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38006	0.84152	0.19010	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40137	0.95467	0.15297	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.36963	0.84407	0.40037	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48161	0.73085	0.85529	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36658	0.62724	0.83909	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25383	0.75430	0.18022	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03570	0.95627	0.16927	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18755	0.52776	0.12693	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.12208	0.51375	0.46681	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02367	0.58510	0.16937	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41500	0.85367	0.28913	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16398	0.57234	0.30724	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.30602	0.92677	0.41330	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15385	0.61096	0.40204	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.26859	0.70807	0.43213	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38142	0.58316	0.06811	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25170	0.49459	0.85834	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05668	0.91096	0.40391	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.45228	0.80538	0.13744	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06692	0.65033	0.40385	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15687	0.61041	0.19606	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23629	0.24767	0.95032	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46888	0.22565	0.97377	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.20867	0.47943	0.97036	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.81385	0.67423	0.53699	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.68369	0.61410	0.60522	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.77909	0.67067	0.59792	Biso	1.000	O
H3	1.0000	0.79528	0.74703	0.61118	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.36974	0.42665	0.32210	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.36672	0.35993	0.28143	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.30833	0.38927	0.37550	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.34610	0.47564	0.27996	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.57491	0.55465	0.28377	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.51195	0.42301	0.41582	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.53862	0.34726	0.36339	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.50607	0.42185	0.50620	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.49195	0.32819	0.56570	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.51313	0.51753	0.55210	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.55936	0.54504	0.63694	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.48117	0.58924	0.50553	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.44811	0.65647	0.56409	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.48315	0.59063	0.41507	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.47789	0.67946	0.36234	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.49109	0.50257	0.36135	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.57637	0.49012	0.24335	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.65934	0.61095	0.30836	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.55108	0.60196	0.24015	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.48363	0.30998	0.30643	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.53690	0.28163	0.40297	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.62380	0.39617	0.33711	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.56837	0.34624	0.60052	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.45994	0.25079	0.52922	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.42949	0.31397	0.61653	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.55332	0.60775	0.67562	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.56915	0.48468	0.67586	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.40279	0.68952	0.52871	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.51937	0.72528	0.59725	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.39259	0.60191	0.61649	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.41229	0.64582	0.31194	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.55726	0.73123	0.32785	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.46607	0.73451	0.40573	Biso	1.000	H

TS3-4 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04247	0.16755	0.52089	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.07590	0.29132	0.51053	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.27993	0.39360	0.83567	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13667	0.48396	0.79611	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25100	0.26800	0.06450	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17734	0.11106	0.28252	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04790	0.16835	0.72805	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15115	0.06178	0.18739	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15288	0.06069	0.39448	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.07167	0.14667	0.61640	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25713	0.27323	0.85232	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36383	0.27019	0.82806	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24074	0.03099	0.15754	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47909	0.18819	0.13604	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04679	0.39912	0.52695	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16273	0.18855	0.79184	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25553	0.49625	0.06828	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37750	0.06314	0.18663	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23508	0.38110	0.09885	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02470	0.28247	0.74049	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39900	0.08571	0.30185	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11200	0.14461	0.45370	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07384	0.44706	0.63800	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36736	0.05366	0.40037	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28978	0.09601	0.43437	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39051	0.30327	0.08783	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04233	0.40225	0.73403	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.48747	0.27669	0.86347	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.15360	0.15070	0.12347	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.93078	0.60754	0.40286	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.72025	0.50772	0.85971	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58843	0.93951	0.73854	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.73007	0.62232	0.84271	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95173	0.72562	0.15845	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81512	0.82395	0.12607	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56520	0.90832	0.62451	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85720	0.86357	0.47325	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91696	0.59075	0.28645	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59572	0.94380	0.52618	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.67754	0.90734	0.49080	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57101	0.69903	0.83487	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80582	0.83986	0.78698	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92932	0.60800	0.18499	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48236	0.72462	0.06414	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.92421	0.82655	0.40539	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90868	0.70947	0.44945	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69577	0.62201	0.07231	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48629	0.88891	0.47224	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71134	0.73742	0.86122	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81307	0.92409	0.63973	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82040	0.51673	0.14053	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81833	0.94581	0.74061	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.91718	0.82664	0.19890	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.81770	0.94889	0.52261	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.86796	0.79904	0.30643	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.82839	0.47746	0.44769	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48616	0.82054	0.79412	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71666	0.74328	0.06806	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61040	0.74250	0.10179	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72292	0.96685	0.77027	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82720	0.43976	0.61201	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47758	0.10711	0.45388	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65436	0.07304	0.51895	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81532	0.39015	0.51706	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.69649	0.28981	0.50515	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59500	0.41720	0.85109	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.50633	0.18740	0.79250	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72207	0.50978	0.06344	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91442	0.09383	0.50476	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81359	0.39752	0.72454	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90437	0.35405	0.50267	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58080	0.16034	0.73390	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57660	0.05478	0.77208	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58906	0.15448	0.52876	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93050	0.04702	0.76916	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.78976	0.49022	0.78816	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48629	0.27766	0.07086	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59762	0.38582	0.08697	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.70332	0.25798	0.73450	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.93385	0.39909	0.76368	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.53442	0.13799	0.63774	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.49506	0.77499	0.95417	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76553	0.50402	0.95311	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74189	0.78635	0.97076	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38066	0.84353	0.19149	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40052	0.95448	0.15031	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37444	0.84462	0.39693	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47963	0.73007	0.85773	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36413	0.62616	0.84439	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25290	0.75901	0.19328	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03488	0.95850	0.18080	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.20081	0.53703	0.13588	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14734	0.50757	0.46081	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02697	0.59307	0.15072	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.42837	0.86434	0.28736	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13702	0.56596	0.30566	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.30795	0.92457	0.41115	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15510	0.60407	0.40397	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27297	0.70564	0.41756	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38378	0.57904	0.06380	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.24523	0.49661	0.86386	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05746	0.91969	0.39947	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.44202	0.79792	0.13534	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06602	0.63369	0.43420	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15356	0.61403	0.19515	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22332	0.23928	0.95020	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47956	0.23368	0.97472	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.20188	0.48625	0.97565	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.86444	0.69810	0.55601	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.67748	0.60747	0.62121	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.84012	0.69165	0.61977	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.67757	0.60491	0.69232	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.67539	0.54015	0.58372	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.66496	0.66871	0.58676	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.85906	0.76719	0.63688	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.35870	0.41898	0.32058	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.35652	0.35262	0.27987	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.29735	0.38113	0.37388	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.33495	0.46825	0.27872	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.56272	0.54719	0.28182	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.50208	0.41641	0.41461	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.54309	0.35118	0.36301	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.48271	0.40596	0.50377	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.48038	0.31482	0.55968	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.46709	0.48842	0.55203	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.48050	0.49646	0.64354	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.45337	0.57196	0.50368	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.42212	0.64283	0.55942	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.47157	0.58279	0.41437	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.48210	0.67979	0.36248	Biso	1.000	C
C14	1.0000	0.47964	0.49497	0.35997	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.56410	0.48284	0.24122	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.64747	0.60400	0.30580	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.53815	0.59392	0.23825	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.49206	0.31154	0.30438	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.54745	0.28798	0.40174	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.62798	0.40792	0.33910	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.47042	0.24661	0.51870	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.40829	0.28004	0.60443	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.55495	0.34394	0.60103	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.46815	0.55541	0.68182	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.48511	0.43296	0.68190	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.39580	0.69080	0.52018	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.49005	0.70019	0.60283	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.35157	0.58860	0.60241	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.42103	0.65396	0.30864	Biso	1.000	H
H24	1.0000	0.56507	0.72615	0.33224	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.47413	0.73775	0.40521	Biso	1.000	H

TS4-5 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05649	0.18441	0.50838	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.07960	0.30439	0.49508	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28974	0.40055	0.83790	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.15063	0.49142	0.78285	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26352	0.27834	0.05353	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.15970	0.08340	0.27361	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.06636	0.18099	0.71182	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15678	0.07026	0.17209	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15779	0.06793	0.39078	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.10301	0.17413	0.60020	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26617	0.27885	0.84798	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.37602	0.27929	0.82902	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.25314	0.05043	0.14096	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.49209	0.20241	0.13174	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05209	0.41231	0.51467	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.17827	0.20091	0.77982	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26360	0.51059	0.05782	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38557	0.07560	0.17559	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.25715	0.39867	0.07723	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.03651	0.29056	0.72659	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40263	0.09036	0.29114	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11893	0.16280	0.43365	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08209	0.45693	0.62639	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37616	0.06957	0.39127	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29996	0.11536	0.42125	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40354	0.31138	0.06856	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.05386	0.41040	0.72222	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.50197	0.28570	0.85871	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.17157	0.17859	0.12906	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93669	0.62387	0.39494	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.73807	0.51984	0.85700	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.60060	0.95201	0.72065	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.74462	0.63229	0.83562	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96497	0.73500	0.14025	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81606	0.82309	0.12677	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56242	0.92397	0.60766	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85077	0.87525	0.44080	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.93264	0.61359	0.27812	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.60437	0.96269	0.51136	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68889	0.92682	0.48369	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58599	0.70898	0.83355	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81576	0.85397	0.78027	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93872	0.61905	0.17593	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.49338	0.74512	0.05208	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.94077	0.84482	0.39950	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90457	0.71965	0.44165	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69733	0.62678	0.06179	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.50306	0.90916	0.44834	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.72769	0.74845	0.85494	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82452	0.91132	0.62239	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82441	0.52707	0.13945	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.83172	0.95161	0.72037	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.93920	0.84246	0.17943	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82704	0.95869	0.50940	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.92880	0.83562	0.29235	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83592	0.49346	0.43948	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.50705	0.82981	0.77766	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72522	0.75050	0.05955	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61883	0.75383	0.08541	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.74018	0.98307	0.73780	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.84200	0.45855	0.60482	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48876	0.12981	0.44109	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.66341	0.09209	0.50597	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82377	0.40736	0.50973	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70310	0.30957	0.50059	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.61349	0.42578	0.85822	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51991	0.20027	0.78289	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.73345	0.52090	0.05563	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92763	0.10357	0.50567	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82692	0.40912	0.71592	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90926	0.36728	0.49257	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59205	0.17248	0.72213	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.58982	0.06679	0.75874	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59689	0.17228	0.51849	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.94650	0.05389	0.74089	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.80345	0.49788	0.78463	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49976	0.28498	0.05954	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.61064	0.39410	0.07291	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71468	0.26993	0.71976	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94552	0.40599	0.75445	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54101	0.15056	0.62736	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.49935	0.78802	0.94042	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.79126	0.52557	0.94911	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76395	0.79875	0.96448	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38588	0.85458	0.17264	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40307	0.96590	0.13502	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37834	0.85893	0.38770	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.49322	0.74052	0.84578	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37901	0.63570	0.82846	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26375	0.76130	0.15392	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04540	0.97237	0.13870	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19458	0.52803	0.12975	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14903	0.52082	0.44658	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02999	0.59440	0.14179	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.40984	0.86535	0.27356	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.15629	0.60029	0.29583	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31731	0.94219	0.41034	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16267	0.62430	0.39653	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27876	0.72357	0.42034	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38812	0.60381	0.06142	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25828	0.50861	0.85403	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06927	0.93396	0.42822	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.47013	0.82908	0.12616	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07202	0.65161	0.42670	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16125	0.62194	0.18041	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22212	0.23384	0.94254	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.49473	0.23307	0.96692	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21460	0.50932	0.96459	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.81894	0.68859	0.52707	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.55628	0.49064	0.68262	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.77810	0.68220	0.58531	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.57293	0.53553	0.74479	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.47528	0.41478	0.68964	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.61958	0.46630	0.67395	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.80009	0.75923	0.60253	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.66504	0.62216	0.30115	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.67263	0.69147	0.26145	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.71885	0.65665	0.35892	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.69450	0.57602	0.26146	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.46498	0.49355	0.24944	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.50563	0.61562	0.38177	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.48859	0.69682	0.32731	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.49175	0.60800	0.47114	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.44231	0.66467	0.52463	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.52115	0.53644	0.52131	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.55544	0.56496	0.60929	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.51653	0.44197	0.47506	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.48351	0.33761	0.52785	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.53579	0.44985	0.38606	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.55059	0.36448	0.33529	Biso	1.000	C
C14	1.0000	0.54261	0.54503	0.33171	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.46737	0.55819	0.20688	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.37839	0.43840	0.27034	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.49122	0.44563	0.20905	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.53920	0.72185	0.26726	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.51282	0.77268	0.36453	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.40122	0.66017	0.30680	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.40073	0.69609	0.48325	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.50368	0.73303	0.56530	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.37917	0.60407	0.57017	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.67935	0.63087	0.58404	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.54629	0.63323	0.63532	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.45780	0.26751	0.48394	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.41105	0.31820	0.56936	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.54914	0.34411	0.57160	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.60778	0.40222	0.27955	Biso	1.000	H
H24	1.0000	0.47119	0.30041	0.30740	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.58394	0.32372	0.37641	Biso	1.000	H

TS5-6 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04979	0.18408	0.52339	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.07430	0.30533	0.51934	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28787	0.40097	0.85873	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14091	0.48531	0.80023	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25815	0.27941	0.06669	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.15805	0.09253	0.29013	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05192	0.18135	0.72848	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14969	0.07770	0.18877	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15788	0.07606	0.40704	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.07968	0.15985	0.61772	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25486	0.27591	0.86519	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35973	0.26627	0.84826	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24280	0.05525	0.15344	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48368	0.19802	0.14192	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05291	0.41821	0.53056	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16792	0.20684	0.79351	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25771	0.51327	0.07248	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37325	0.07408	0.18672	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.26162	0.40549	0.08576	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02093	0.29117	0.73433	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39206	0.09331	0.30169	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12634	0.17437	0.45412	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07990	0.46651	0.64176	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37157	0.06971	0.40212	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29868	0.11650	0.43821	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39785	0.30771	0.07481	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04540	0.41369	0.73544	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.49242	0.28453	0.87081	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.16664	0.18753	0.14683	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93399	0.62274	0.40445	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.72125	0.51799	0.86553	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59019	0.95140	0.73569	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.73206	0.63170	0.84139	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96077	0.74328	0.15521	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.80819	0.82415	0.13836	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56054	0.91904	0.62204	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.84581	0.86713	0.46669	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.92696	0.61426	0.28764	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59793	0.95686	0.52486	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68188	0.92139	0.49383	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57922	0.71345	0.84222	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80864	0.85391	0.79022	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93659	0.62617	0.18566	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48667	0.74860	0.06597	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.93768	0.84738	0.41464	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91473	0.72513	0.45292	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68999	0.62606	0.07606	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49320	0.90275	0.46542	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71940	0.74972	0.86557	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82254	0.93375	0.63950	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82501	0.53386	0.14525	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82296	0.95820	0.73978	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.93077	0.84786	0.19511	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82203	0.96026	0.52257	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.91696	0.84063	0.30808	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.82902	0.49407	0.44970	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49287	0.83070	0.79233	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71753	0.74955	0.07170	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61065	0.75245	0.09630	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72726	0.98179	0.76316	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.83111	0.45572	0.61431	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48749	0.12619	0.44738	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65684	0.08619	0.51942	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82045	0.40790	0.51863	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70405	0.30435	0.50622	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59510	0.42872	0.87102	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51866	0.21098	0.78894	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72616	0.52047	0.06599	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92338	0.10377	0.50433	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81653	0.40751	0.72572	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.91256	0.37661	0.50288	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58543	0.17401	0.73033	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57381	0.06488	0.76872	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59380	0.16988	0.52693	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93483	0.05930	0.76920	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77973	0.48864	0.79199	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49556	0.28285	0.07027	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60576	0.39198	0.08795	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71120	0.26458	0.72835	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.93940	0.41494	0.76681	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.53626	0.15419	0.63497	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.48505	0.78007	0.95260	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77748	0.52513	0.95647	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.75611	0.79576	0.97597	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38522	0.85777	0.18720	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.37928	0.95753	0.14722	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37625	0.86078	0.39648	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48282	0.73922	0.85639	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37193	0.63230	0.83480	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26816	0.75178	0.18053	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03580	0.98112	0.15812	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17571	0.51563	0.14056	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.15448	0.52392	0.46269	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03172	0.60760	0.15130	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.42375	0.88207	0.28530	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13482	0.57717	0.30762	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31241	0.94168	0.41887	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15629	0.61742	0.40520	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27239	0.72243	0.41427	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.37712	0.61267	0.08786	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25311	0.50768	0.86776	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06512	0.94213	0.44088	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.47321	0.84418	0.13407	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06625	0.64375	0.43861	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15341	0.61531	0.19470	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.20578	0.22918	0.95836	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.49700	0.23376	0.97758	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21631	0.51899	0.97784	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.87907	0.71668	0.55911	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.48401	0.45315	0.69903	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.49268	0.49497	0.76212	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.40188	0.37765	0.69875	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.54585	0.42641	0.69716	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.65670	0.62435	0.31829	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.53050	0.44809	0.39833	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.55930	0.37152	0.34794	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.50292	0.43414	0.48590	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.48879	0.33496	0.53736	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.48727	0.51702	0.53344	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.49349	0.53031	0.62515	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.46795	0.59500	0.48165	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.42122	0.65652	0.53200	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.49038	0.60769	0.39335	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.47792	0.69155	0.33820	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.53332	0.54146	0.34433	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.69235	0.58274	0.28005	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.70649	0.65935	0.37808	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.66348	0.69335	0.27871	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.61517	0.41411	0.29246	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.48440	0.30113	0.31968	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.60026	0.33845	0.38918	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.41138	0.29671	0.57563	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.55750	0.35645	0.58341	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.48312	0.27201	0.49237	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.48143	0.59710	0.64951	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.48282	0.72002	0.57620	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.35079	0.59849	0.57334	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.39045	0.69634	0.48827	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.52748	0.71337	0.27776	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.50630	0.76884	0.37461	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.39087	0.65851	0.31843	Biso	1.000	H
C14	1.0000	0.45990	0.48886	0.26020	Biso	1.000	C
H21	1.0000	0.49197	0.44580	0.21995	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.37390	0.42877	0.27964	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.45834	0.55203	0.21828	Biso	1.000	H
C15	1.0000	0.69158	0.63618	0.61097	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.85217	0.71130	0.62223	Biso	1.000	O
H24	1.0000	0.68194	0.64648	0.68040	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.68845	0.56087	0.58832	Biso	1.000	H
H26	1.0000	0.68914	0.69257	0.56277	Biso	1.000	H

H27 1.0000 0.87263 0.78751 0.63852 Biso 1.000 H

TS-MS1/C2 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04660	0.17008	0.52487	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08358	0.29514	0.51442	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.27837	0.39205	0.83343	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14090	0.49012	0.79624	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25559	0.27308	0.06838	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17816	0.11665	0.28484	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04462	0.17081	0.73250	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15117	0.06513	0.19021	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15303	0.06187	0.39589	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.07121	0.14838	0.62165	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25601	0.27262	0.85390	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35986	0.26582	0.82562	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23891	0.03099	0.16195	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47917	0.18942	0.13776	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05224	0.40203	0.52722	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15554	0.18552	0.79960	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25848	0.49865	0.06884	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37691	0.06407	0.18776	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23973	0.38596	0.10520	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02666	0.28887	0.74094	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40030	0.08588	0.30301	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11954	0.14751	0.46069	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08075	0.45384	0.63737	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36885	0.05499	0.40173	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29019	0.09636	0.43468	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39512	0.30957	0.09462	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04649	0.40946	0.73357	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.48476	0.27638	0.86498	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.15670	0.15443	0.12501	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.93321	0.61003	0.40347	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.71766	0.50858	0.85891	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58196	0.93426	0.73500	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.72666	0.62158	0.83647	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95441	0.72977	0.16172	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81550	0.82349	0.12515	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.55872	0.89042	0.62276	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85946	0.86730	0.47386	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91709	0.59019	0.28666	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59430	0.93926	0.52787	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68107	0.91225	0.48848	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57487	0.70961	0.83793	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80651	0.84472	0.78482	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92952	0.61056	0.18563	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48322	0.72820	0.06267	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.92368	0.82767	0.40573	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91030	0.71149	0.44666	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69168	0.62087	0.07319	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48837	0.88831	0.46927	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71350	0.73950	0.85776	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81259	0.93748	0.64055	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.81988	0.52124	0.14066	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81485	0.95070	0.74176	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.91717	0.82977	0.20054	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.82054	0.95248	0.52331	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.86464	0.80205	0.30703	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83404	0.47962	0.44968	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.47868	0.81927	0.79373	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71775	0.74396	0.06600	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61256	0.74735	0.09777	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71553	0.96541	0.77266	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81509	0.42014	0.61042	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47866	0.11067	0.45561	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.64844	0.06808	0.53234	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81761	0.38557	0.51291	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70443	0.28253	0.48774	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59178	0.41775	0.86149	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51175	0.19146	0.79544	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72311	0.51207	0.06098	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91970	0.09799	0.50424	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81127	0.39352	0.72525	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.91147	0.35581	0.50022	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58441	0.16500	0.73383	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56293	0.04780	0.75833	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59241	0.15771	0.52795	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92400	0.05356	0.77372	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.78011	0.48203	0.78717	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48611	0.27830	0.07191	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60123	0.38377	0.08248	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71037	0.25131	0.74593	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.93956	0.41012	0.76150	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54836	0.16664	0.63648	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.49033	0.77966	0.95442	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77097	0.51403	0.95119	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74649	0.78484	0.96865	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38083	0.84567	0.19112	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40004	0.95604	0.14921	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37552	0.84594	0.39557	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47882	0.73335	0.85870	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36731	0.62437	0.84657	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25299	0.76147	0.19456	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03370	0.96360	0.18389	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.20394	0.54346	0.13286	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14967	0.50861	0.45748	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02606	0.59468	0.14925	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43048	0.86806	0.28641	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13562	0.56318	0.30219	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31021	0.92594	0.41369	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15659	0.60436	0.39984	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27697	0.70416	0.40942	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38664	0.58166	0.06323	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.24673	0.49649	0.86396	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05705	0.92165	0.39677	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.44138	0.79829	0.13605	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07109	0.63794	0.43086	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15301	0.61653	0.19304	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23122	0.24716	0.95389	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46834	0.22987	0.97639	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.20360	0.48164	0.97604	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.82612	0.67444	0.56254	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.50432	0.51446	0.69169	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.78551	0.64682	0.61842	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.47888	0.49976	0.76085	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.56913	0.49283	0.68065	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.54308	0.60373	0.67850	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.81904	0.71145	0.65725	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.35047	0.46553	0.33446	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.35787	0.43417	0.27008	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.30481	0.40055	0.38312	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.31693	0.52118	0.32589	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.56673	0.54698	0.26684	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.51306	0.42431	0.40320	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.55746	0.36004	0.35384	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.48128	0.40746	0.49190	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.49409	0.32432	0.54684	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.43885	0.47125	0.53441	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.40306	0.44770	0.63037	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.44002	0.56069	0.49189	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.40594	0.63202	0.54345	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.47669	0.58349	0.40056	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.51663	0.69671	0.35923	Biso	1.000	C
C14	1.0000	0.50873	0.51168	0.35550	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.54990	0.47529	0.22617	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.65693	0.59608	0.27884	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.54325	0.59890	0.22908	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.50472	0.31731	0.29650	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.56113	0.29763	0.39429	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.64182	0.41562	0.32859	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.57219	0.32875	0.52923	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.42480	0.23990	0.53584	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.49773	0.34108	0.61730	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.33972	0.47064	0.64438	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.36401	0.35839	0.64439	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.40541	0.69649	0.50400	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.46208	0.67205	0.59945	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.32184	0.58199	0.57048	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.47942	0.69287	0.29468	Biso	1.000	H
H24	1.0000	0.60720	0.73780	0.34991	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.50105	0.74962	0.40216	Biso	1.000	H

TS-MS2/C2 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
 _symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.03693	0.17208	0.51458	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.06425	0.29088	0.48481	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28086	0.39379	0.82379	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13604	0.48896	0.79479	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.24701	0.26623	0.06177	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16328	0.10940	0.28196	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.03523	0.17565	0.73060	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14255	0.05879	0.18703	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14443	0.05860	0.39443	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.05932	0.17290	0.61587	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25138	0.27213	0.84618	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35193	0.25823	0.82071	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23227	0.02574	0.16317	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.46942	0.17928	0.12704	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.03451	0.39182	0.52692	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15115	0.18881	0.78978	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.24897	0.49020	0.06499	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37098	0.05921	0.18496	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23356	0.37916	0.10207	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00575	0.28384	0.75681	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39868	0.08543	0.29956	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11814	0.14619	0.46426	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08681	0.43166	0.63604	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36215	0.05200	0.39726	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28335	0.09382	0.42850	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.38644	0.30081	0.08517	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04179	0.40691	0.73279	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48285	0.28216	0.85685	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15007	0.14682	0.11938	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92465	0.60630	0.39329	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.70871	0.50672	0.85465	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58275	0.94070	0.73646	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.73418	0.62823	0.84673	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95322	0.72333	0.16427	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.80774	0.81001	0.12497	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56104	0.91109	0.62159	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.84285	0.85111	0.47496	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.87249	0.57132	0.28305	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59187	0.94403	0.52276	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.67301	0.90645	0.48839	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.56938	0.70161	0.83223	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80298	0.84255	0.78321	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.91676	0.60035	0.18677	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.47787	0.72264	0.06197	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.91484	0.82037	0.40716	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90543	0.70482	0.44670	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68662	0.61477	0.05913	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48242	0.88634	0.46832	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71009	0.74091	0.85850	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.80798	0.93515	0.63815	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82183	0.51860	0.12471	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81247	0.94858	0.73948	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91226	0.82197	0.19988	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.81309	0.94538	0.52047	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86091	0.79819	0.30675	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85691	0.47456	0.44550	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48133	0.82102	0.79235	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71050	0.73737	0.06307	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.60413	0.73509	0.09894	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71518	0.96567	0.77188	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.79351	0.42796	0.60544	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.46963	0.10553	0.45409	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.64974	0.07258	0.51250	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.80874	0.38233	0.51554	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.69366	0.28868	0.48243	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.57974	0.42760	0.84740	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51867	0.20525	0.78589	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.71456	0.50313	0.05490	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91247	0.08779	0.49368	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.80826	0.40089	0.71824	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.88785	0.33349	0.52866	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58852	0.16859	0.73091	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56718	0.05506	0.76713	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58869	0.15766	0.52114	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92362	0.04973	0.76967	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.76971	0.48404	0.77934	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48116	0.27424	0.06602	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59350	0.37953	0.08749	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71505	0.25577	0.73831	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94257	0.42701	0.74476	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54908	0.15606	0.63296	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.48982	0.77310	0.95230	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.75110	0.48829	0.94493	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.73802	0.78997	0.96876	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.37366	0.83751	0.18914	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.39414	0.94997	0.15115	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.36632	0.84066	0.39768	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47684	0.73068	0.85516	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36237	0.62566	0.84113	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.24663	0.75134	0.18390	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.02604	0.95604	0.17798	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18286	0.52786	0.12321	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.10852	0.51357	0.46393	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.01595	0.58011	0.17176	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41420	0.85143	0.28697	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16368	0.56305	0.30381	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.30220	0.92289	0.40794	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15111	0.60846	0.39534	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.26822	0.70162	0.42661	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.37581	0.57838	0.06554	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.24528	0.49472	0.85788	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.04669	0.91933	0.40204	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.44218	0.79845	0.13476	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07173	0.65590	0.38627	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15036	0.60639	0.19513	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22259	0.24703	0.94601	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47663	0.23794	0.96783	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.20170	0.47261	0.96948	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.94574	0.71469	0.58193	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.65292	0.60430	0.63064	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.97027	0.70470	0.64032	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.68888	0.63182	0.69610	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.69537	0.56448	0.59939	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.67242	0.67814	0.59115	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.95267	0.74926	0.67978	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.32831	0.48647	0.42734	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.31733	0.40333	0.42586	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.28345	0.49952	0.48059	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.30766	0.51103	0.36479	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.54359	0.53233	0.25563	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.51832	0.42744	0.39944	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.55039	0.35344	0.34915	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.49914	0.41726	0.49342	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.49338	0.32317	0.54706	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.48850	0.49801	0.53991	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.52502	0.52232	0.63564	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.46616	0.57431	0.49243	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.44762	0.65487	0.54702	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.48639	0.58604	0.39737	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.50300	0.68771	0.34802	Biso	1.000	C
C14	1.0000	0.51591	0.51301	0.35275	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.54145	0.46108	0.22366	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.62741	0.60456	0.24665	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.48590	0.55049	0.21969	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.48941	0.30706	0.29726	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.55782	0.29427	0.39089	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.63127	0.40407	0.31655	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.57349	0.34647	0.57776	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.46642	0.24997	0.50628	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.43173	0.29929	0.60011	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.48436	0.55980	0.67267	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.50859	0.44764	0.67216	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.41356	0.69698	0.50898	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.52628	0.71698	0.57666	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.38907	0.61065	0.60101	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.44657	0.66682	0.29164	Biso	1.000	H
H24	1.0000	0.58846	0.73120	0.32211	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.49507	0.74599	0.39070	Biso	1.000	H

TS-MS3/C2 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.03871	0.17213	0.51407	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.06224	0.28947	0.48458	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28062	0.39316	0.82181	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13778	0.49021	0.79142	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.24624	0.26654	0.06113	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16379	0.10966	0.28107	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.03592	0.17521	0.72979	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14298	0.05890	0.18620	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14572	0.06051	0.39388	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.06226	0.17365	0.61532	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25155	0.27187	0.84538	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35223	0.25792	0.82025	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23310	0.02643	0.16232	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47017	0.18132	0.12795	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.03256	0.39098	0.52434	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15149	0.18791	0.78916	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.24823	0.49109	0.06311	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37182	0.05989	0.18445	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23106	0.37906	0.09931	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00780	0.28406	0.75653	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39995	0.08523	0.29904	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12277	0.15062	0.46347	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08107	0.43031	0.63440	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36279	0.05180	0.39662	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28392	0.09368	0.42744	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.38556	0.30141	0.08518	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04088	0.40629	0.73231	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.48286	0.28222	0.85779	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.14978	0.14660	0.11848	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.92681	0.60746	0.39286	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.70757	0.50605	0.85513	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58374	0.94165	0.73572	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.73399	0.62770	0.84546	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95195	0.72340	0.16160	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.80647	0.81271	0.12728	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56339	0.91465	0.62054	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.83987	0.84699	0.47591	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.87407	0.57471	0.28276	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59427	0.94860	0.52184	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.67553	0.91167	0.48653	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57161	0.70345	0.83249	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80338	0.84247	0.78259	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.91738	0.60137	0.18619	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.47710	0.72261	0.06093	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.91555	0.82056	0.40830	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91019	0.70683	0.44762	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68940	0.61701	0.06131	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48477	0.89137	0.46760	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71190	0.74149	0.85877	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.80637	0.93397	0.63741	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82241	0.51767	0.12492	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81222	0.94804	0.73866	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.91222	0.82219	0.19980	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.81324	0.94429	0.51979	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.86348	0.79785	0.30734	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85270	0.47515	0.44364	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48228	0.82131	0.79077	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71189	0.73911	0.06353	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.60408	0.73598	0.09623	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71564	0.96580	0.77178	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.80121	0.43332	0.60583	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.46993	0.10620	0.45380	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65210	0.07736	0.51296	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.80813	0.38452	0.51487	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.68972	0.29249	0.48676	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.57833	0.42800	0.84864	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52101	0.20643	0.78771	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.71509	0.50404	0.05586	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91527	0.08542	0.49318	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.80869	0.40082	0.71837	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.88606	0.33347	0.52253	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58791	0.16809	0.73077	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56747	0.05519	0.76763	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58735	0.15897	0.52246	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92398	0.04909	0.76778	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.76662	0.48047	0.78011	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48088	0.27556	0.06667	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59257	0.38162	0.08797	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71486	0.25483	0.73411	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94111	0.42444	0.74864	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54427	0.15338	0.63391	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.48608	0.77081	0.95071	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.75032	0.48856	0.94551	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74249	0.79097	0.96892	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.37479	0.83884	0.18748	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.39531	0.95134	0.14939	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.36807	0.84107	0.39692	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47726	0.73054	0.85335	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36449	0.62467	0.83576	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.24798	0.75229	0.18090	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.02673	0.95577	0.17757	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18043	0.52784	0.12007	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.11420	0.51118	0.46142	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.01715	0.58187	0.17238	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41401	0.85253	0.28559	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16939	0.56621	0.30205	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.30312	0.92279	0.40757	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15498	0.60787	0.39455	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27049	0.70237	0.42757	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.37523	0.57847	0.06593	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.24625	0.49534	0.85520	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.04603	0.92268	0.40508	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.44446	0.80080	0.13353	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07279	0.65233	0.38726	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15185	0.60759	0.19395	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22279	0.24786	0.94516	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47620	0.23818	0.96873	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.20392	0.47626	0.96676	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.94297	0.71222	0.58366	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.65493	0.59586	0.62565	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.96127	0.70018	0.64381	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.69592	0.62132	0.68971	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.69107	0.55229	0.59071	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.67587	0.67111	0.58766	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.96093	0.75908	0.67861	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.32572	0.44913	0.52184	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.30362	0.39418	0.46496	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.30841	0.40416	0.58471	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.28609	0.49991	0.52233	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.53576	0.53337	0.25943	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.51439	0.42708	0.40324	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.54351	0.35366	0.34933	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.49508	0.41403	0.49387	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.48176	0.31740	0.54804	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.48380	0.49700	0.54279	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.52679	0.52033	0.63696	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.46568	0.57712	0.49654	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.46291	0.66779	0.55009	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.48591	0.58907	0.40156	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.48733	0.68308	0.35090	Biso	1.000	C
C14	1.0000	0.51104	0.51673	0.35743	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.53227	0.46151	0.22746	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.61965	0.60507	0.24917	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.47729	0.55151	0.22491	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.48013	0.30803	0.29873	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.55312	0.29425	0.38917	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.62274	0.40489	0.31455	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.55650	0.33856	0.58668	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.46062	0.24607	0.50657	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.41289	0.29111	0.59542	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.49342	0.56331	0.67592	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.50726	0.44456	0.67315	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.41412	0.69873	0.51731	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.54771	0.73616	0.55950	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.42593	0.63852	0.61536	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.41159	0.65336	0.31085	Biso	1.000	H
H24	1.0000	0.55859	0.72124	0.30566	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.49562	0.74878	0.39452	Biso	1.000	H

TS9-10/C2 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04366	0.16687	0.52052	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.07160	0.28930	0.51638	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28098	0.39035	0.83858	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13971	0.48240	0.79113	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25051	0.26662	0.06384	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.18028	0.11755	0.28048	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04320	0.16839	0.72685	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15018	0.06223	0.18732	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15533	0.06718	0.39223	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.06553	0.13994	0.61660	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25427	0.26828	0.85197	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35751	0.26044	0.82341	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23759	0.02803	0.15839	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47610	0.18574	0.13355	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04388	0.39853	0.52448	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15647	0.18763	0.79220	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25425	0.49455	0.06548	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37555	0.06101	0.18511	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23292	0.37925	0.09646	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02057	0.28350	0.73309	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39990	0.08265	0.30015	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12324	0.15443	0.45644	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.06952	0.45138	0.63457	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36729	0.05071	0.39855	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28780	0.09096	0.43159	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39042	0.30407	0.08795	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04154	0.40474	0.73048	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48532	0.27820	0.86170	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15161	0.14790	0.12051	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93493	0.60906	0.39976	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71326	0.50617	0.85584	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58369	0.93597	0.73584	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.73242	0.62364	0.83458	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95368	0.72685	0.15747	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81474	0.82140	0.12312	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56277	0.90303	0.62182	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85271	0.85658	0.47317	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91655	0.58978	0.28391	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59606	0.94431	0.52486	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.67910	0.91030	0.48813	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57242	0.70066	0.82970	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80685	0.84128	0.78302	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92928	0.60806	0.18240	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48114	0.72216	0.06165	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92527	0.82803	0.40358	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.92413	0.71729	0.44762	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69264	0.61925	0.07015	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48812	0.89163	0.46904	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71217	0.73739	0.85659	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81374	0.93064	0.63772	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82032	0.51810	0.13720	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81575	0.94713	0.73901	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91612	0.82575	0.19794	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.81812	0.94767	0.51982	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86629	0.79521	0.30560	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.82942	0.48160	0.44704	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48169	0.81771	0.79220	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71566	0.74121	0.06506	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61013	0.74194	0.09871	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71744	0.96301	0.76968	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82646	0.43739	0.60989	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47628	0.10688	0.45345	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65375	0.07377	0.52188	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81459	0.39081	0.51377	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.69546	0.29121	0.50024	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58514	0.42274	0.85295	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52038	0.19915	0.79245	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72026	0.50804	0.06033	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91846	0.08989	0.49595	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81202	0.39344	0.72228	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90265	0.35404	0.49701	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58399	0.16162	0.73089	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56843	0.05018	0.76682	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58859	0.15590	0.52690	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92533	0.04972	0.77005	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77321	0.47671	0.78352	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48471	0.27666	0.06945	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59764	0.38310	0.08552	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71070	0.24949	0.72899	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.93637	0.40569	0.76438	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.53494	0.14553	0.63584	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.49320	0.77075	0.95121	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76107	0.50341	0.94851	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74144	0.78319	0.96735	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.37967	0.84188	0.18861	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.39905	0.95287	0.14787	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37524	0.84120	0.39394	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47873	0.72767	0.85439	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36499	0.62192	0.84023	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25176	0.75778	0.19112	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03293	0.95969	0.18503	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19906	0.53617	0.13163	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14559	0.50226	0.45580	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02595	0.59192	0.14772	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.42847	0.86204	0.28409	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13576	0.56265	0.30134	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.30925	0.92160	0.40951	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15628	0.60048	0.39951	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27529	0.70067	0.41250	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38256	0.57662	0.06153	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.24557	0.49389	0.86155	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05496	0.92832	0.39715	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.43996	0.79614	0.13127	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06897	0.63202	0.43099	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15272	0.61291	0.19167	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22343	0.23355	0.94991	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47598	0.23362	0.97267	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.20120	0.48475	0.97255	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.92082	0.72522	0.55992	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.69020	0.60220	0.55472	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.89253	0.71328	0.62310	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.78301	0.65679	0.60228	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.70218	0.53457	0.53171	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.70578	0.66654	0.50625	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.90647	0.78578	0.64454	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.34242	0.42142	0.63045	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.30730	0.33221	0.64128	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.39121	0.46471	0.68940	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.27312	0.43783	0.62765	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.53945	0.53379	0.27879	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.49204	0.41729	0.41867	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.53484	0.35051	0.37053	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.44830	0.39255	0.50529	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.45258	0.30413	0.56096	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.40913	0.45892	0.54518	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.61291	0.58054	0.62023	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.42684	0.55857	0.50376	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.39707	0.63234	0.55745	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.47288	0.58402	0.41778	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.49777	0.68812	0.36776	Biso	1.000	C
C14	1.0000	0.49881	0.50982	0.37383	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.52881	0.45981	0.24467	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.62845	0.59742	0.27557	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.49469	0.56608	0.24051	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.48181	0.30683	0.31354	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.53724	0.28847	0.41218	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.61944	0.40438	0.34499	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.53161	0.30721	0.54892	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.38496	0.21963	0.54719	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.44998	0.31876	0.63176	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.58986	0.64208	0.63893	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.58527	0.50967	0.66448	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.42657	0.71340	0.52802	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.43198	0.64578	0.62448	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.30684	0.59453	0.56563	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.43746	0.66924	0.31409	Biso	1.000	H
H24	1.0000	0.58066	0.72746	0.33728	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.49674	0.74968	0.41091	Biso	1.000	H

TS-MS1/C3 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04563	0.18381	0.52557	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08130	0.30784	0.51008	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28501	0.40281	0.86572	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13393	0.48331	0.80860	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25222	0.28039	0.06677	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17831	0.12761	0.29483	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04051	0.18342	0.73569	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14866	0.08509	0.19814	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15274	0.07105	0.40484	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.06529	0.16472	0.62415	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25275	0.27788	0.86454	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35616	0.26914	0.83875	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23486	0.05257	0.16223	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47651	0.20141	0.14180	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05577	0.41712	0.53338	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16144	0.21284	0.79516	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25739	0.51804	0.07539	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.36949	0.07750	0.19089	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24639	0.40250	0.08487	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00579	0.29045	0.74391	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39440	0.10087	0.30568	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12321	0.16045	0.46780	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09224	0.46278	0.64492	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36834	0.06653	0.40443	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28956	0.10426	0.44371	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39410	0.31873	0.08580	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04364	0.41672	0.73852	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48853	0.29136	0.86934	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15668	0.18231	0.14128	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93517	0.62481	0.40592	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71624	0.51862	0.86511	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58650	0.95031	0.74000	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.73791	0.63824	0.85064	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95957	0.75304	0.16673	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81373	0.83570	0.12782	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56248	0.90946	0.62671	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85484	0.87441	0.48139	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.92163	0.61016	0.28904	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59503	0.95303	0.52995	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68051	0.92357	0.49140	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57593	0.71426	0.83566	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80536	0.85288	0.78263	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93495	0.63348	0.18858	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48252	0.74386	0.06751	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.91988	0.83794	0.41124	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90561	0.72081	0.45062	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69672	0.63686	0.06524	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48809	0.89861	0.47236	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71641	0.75281	0.86068	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81529	0.95799	0.64354	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82534	0.54436	0.14326	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81728	0.96313	0.74523	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91670	0.84877	0.20530	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82053	0.96575	0.52584	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86294	0.81799	0.31167	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83999	0.48963	0.44651	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48624	0.83383	0.79946	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71934	0.75915	0.06480	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61138	0.75700	0.09607	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71970	0.97945	0.77861	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81294	0.44515	0.61105	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48153	0.12220	0.45394	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.64977	0.08197	0.53054	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81906	0.40149	0.51724	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70561	0.29797	0.49369	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58755	0.43673	0.86592	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52200	0.21474	0.79580	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72446	0.52456	0.06403	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92028	0.10887	0.50087	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81274	0.41106	0.72444	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.91237	0.36980	0.51539	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58774	0.18009	0.73354	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56716	0.06434	0.76302	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59288	0.17090	0.52941	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92854	0.06080	0.78032	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77128	0.48942	0.78913	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48959	0.29091	0.07396	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60161	0.39862	0.09212	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71497	0.26557	0.73751	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94320	0.43257	0.75908	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54342	0.17399	0.63754	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.47089	0.75951	0.95299	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76702	0.51151	0.95538	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74929	0.80765	0.96929	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38661	0.86113	0.18895	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.37993	0.96234	0.15330	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37923	0.85930	0.39478	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47679	0.73478	0.85345	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36910	0.62925	0.82275	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26819	0.75641	0.18849	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.02987	0.98554	0.18903	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17165	0.52267	0.13795	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14998	0.52718	0.46441	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03246	0.62020	0.15151	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43435	0.88442	0.28509	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.12810	0.57229	0.30691	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31211	0.93741	0.41282	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15592	0.61952	0.40282	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27796	0.71767	0.40546	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.37828	0.60827	0.10259	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25312	0.51153	0.86852	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05374	0.93170	0.40394	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46696	0.84414	0.12820	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07461	0.65833	0.43424	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15013	0.62067	0.19577	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.21037	0.22678	0.95801	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.48622	0.24498	0.97929	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23260	0.53907	0.97923	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.93230	0.73615	0.59530	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.45653	0.45601	0.69132	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.46706	0.49218	0.75716	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.36770	0.41566	0.67416	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.47933	0.39145	0.69463	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.57333	0.56637	0.25135	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.53337	0.44989	0.39033	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.56703	0.37874	0.33792	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.51690	0.44348	0.48125	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.50717	0.34745	0.53405	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.50014	0.52478	0.52754	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.52747	0.54909	0.62524	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.46991	0.59189	0.48179	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.42062	0.65128	0.53168	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.48920	0.60399	0.38744	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.51512	0.71261	0.34370	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.52304	0.53417	0.34226	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.55307	0.49365	0.21091	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.66422	0.61485	0.25970	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.54742	0.61773	0.21596	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.64632	0.43172	0.30383	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.50537	0.33055	0.28689	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.57935	0.32114	0.37835	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.42703	0.30561	0.56869	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.57276	0.37269	0.58350	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.50784	0.28652	0.49010	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.51308	0.61740	0.64224	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.48337	0.72604	0.56555	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.36285	0.59626	0.58255	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.37333	0.67420	0.48825	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.60391	0.75882	0.32620	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.50120	0.76431	0.38959	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.46719	0.70124	0.28345	Biso	1.000	H
C14	1.0000	0.36149	0.47568	0.33125	Biso	1.000	C
H21	1.0000	0.36388	0.43941	0.26770	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.32418	0.41452	0.38404	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.32203	0.52618	0.32262	Biso	1.000	H
C15	1.0000	0.65496	0.59846	0.63380	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.94780	0.72852	0.65724	Biso	1.000	O
H24	1.0000	0.68161	0.62741	0.70110	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.68243	0.53906	0.61807	Biso	1.000	H
H26	1.0000	0.69916	0.66971	0.58896	Biso	1.000	H

H27 1.0000 0.92178 0.77192 0.68961 Biso 1.000 H

TS-MS2/C3 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04792	0.18942	0.52451	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08297	0.31241	0.50236	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28505	0.40398	0.86448	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13185	0.48578	0.81305	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25264	0.28092	0.06799	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17481	0.12560	0.29688	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.03872	0.18527	0.73885	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14828	0.08452	0.19967	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15211	0.07143	0.40763	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.06399	0.17799	0.62526	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25130	0.27849	0.86553	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35407	0.26755	0.84219	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23460	0.05147	0.16503	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47692	0.20181	0.14166	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05254	0.41547	0.53775	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16128	0.21309	0.79519	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25994	0.51884	0.07744	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37037	0.07866	0.19179	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24786	0.40309	0.08766	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00074	0.28889	0.75739	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39592	0.10436	0.30637	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12837	0.16337	0.47339	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09462	0.45244	0.64970	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36807	0.06686	0.40436	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28967	0.10440	0.44457	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39451	0.31786	0.08332	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04221	0.41518	0.74366	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.48746	0.29034	0.86932	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.15846	0.18255	0.14290	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.93562	0.62720	0.40521	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.71435	0.51880	0.86348	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58733	0.95130	0.73885	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.73440	0.63767	0.84858	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96538	0.75369	0.16971	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81570	0.83102	0.12583	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56326	0.91054	0.62543	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.84950	0.87252	0.48054	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91135	0.60439	0.28958	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59699	0.95747	0.52960	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68266	0.92903	0.49004	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57487	0.71512	0.83548	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80274	0.85091	0.77796	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93344	0.63145	0.18992	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48417	0.74524	0.06718	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.91770	0.83759	0.41232	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90149	0.71928	0.45139	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69254	0.63560	0.05901	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49114	0.90514	0.47088	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71573	0.75373	0.85879	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81881	0.96406	0.64166	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82576	0.54804	0.13963	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81800	0.96368	0.74343	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.91853	0.84768	0.20493	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.82225	0.96940	0.52396	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.86490	0.81893	0.31132	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85521	0.49004	0.44798	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48653	0.83549	0.79874	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72037	0.75961	0.06175	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61503	0.76193	0.09403	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72072	0.98037	0.77713	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.80841	0.44720	0.61117	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48081	0.11921	0.45435	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65193	0.08629	0.53277	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82015	0.40085	0.52029	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70602	0.30097	0.49247	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58591	0.43575	0.86507	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52116	0.21408	0.79562	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72334	0.52527	0.06131	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92392	0.11142	0.49740	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81187	0.41244	0.72398	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90687	0.36073	0.52849	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58814	0.18128	0.73316	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56819	0.06542	0.76136	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59322	0.17361	0.52902	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92977	0.05828	0.78067	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.76965	0.49063	0.78721	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49003	0.29013	0.07259	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60262	0.39764	0.08936	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71527	0.26701	0.73809	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94382	0.43638	0.75666	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54460	0.17719	0.63719	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.47125	0.76163	0.95287	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76671	0.51242	0.95309	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.75229	0.81036	0.96688	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38562	0.86070	0.18964	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.38188	0.96386	0.15509	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37944	0.86079	0.39574	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47628	0.73641	0.85336	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36759	0.63118	0.82361	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26585	0.75789	0.18871	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.02959	0.98537	0.18855	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17614	0.52494	0.14127	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.13723	0.53551	0.47455	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02937	0.61270	0.15756	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43291	0.88158	0.28590	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13598	0.57529	0.31170	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31023	0.93736	0.41047	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15715	0.62710	0.40624	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.28176	0.71896	0.41404	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38179	0.60894	0.10218	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25279	0.51259	0.87022	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05146	0.93262	0.40956	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46507	0.84265	0.12873	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.08114	0.67662	0.42505	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15138	0.62028	0.19948	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.20663	0.22932	0.95911	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.48647	0.24282	0.97846	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23320	0.53867	0.98152	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.92907	0.73450	0.59496	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.44812	0.43791	0.68600	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.45277	0.47242	0.75182	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.35983	0.38829	0.66757	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.48187	0.38193	0.69020	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.57610	0.56141	0.24241	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.54559	0.45600	0.38552	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.58826	0.38750	0.33973	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.51510	0.44014	0.47747	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.50578	0.34233	0.52718	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.49383	0.51506	0.52250	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.51225	0.53546	0.62175	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.47494	0.59202	0.47238	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.44915	0.66989	0.52309	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.50602	0.60945	0.37947	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.52698	0.71370	0.33148	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.54229	0.54019	0.33783	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.56784	0.48745	0.21058	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.66324	0.62826	0.23725	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.52560	0.58726	0.20502	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.65966	0.44047	0.29766	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.52412	0.32355	0.29718	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.61587	0.34622	0.38576	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.42642	0.29871	0.56235	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.57274	0.36666	0.57534	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.50661	0.28364	0.48076	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.48669	0.59521	0.64061	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.52383	0.73152	0.55775	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.38396	0.62472	0.57255	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.41980	0.71205	0.48056	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.61339	0.75609	0.30776	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.51909	0.77190	0.37451	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.47304	0.69591	0.27377	Biso	1.000	H
C14	1.0000	0.34448	0.50529	0.39821	Biso	1.000	C
H21	1.0000	0.33704	0.42390	0.39134	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.29244	0.50898	0.45023	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.32932	0.53679	0.33673	Biso	1.000	H
C15	1.0000	0.64057	0.59689	0.63425	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.94710	0.72845	0.65655	Biso	1.000	O
H24	1.0000	0.66173	0.62281	0.70286	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.67654	0.54479	0.61719	Biso	1.000	H
H26	1.0000	0.68146	0.67145	0.59228	Biso	1.000	H

H27 1.0000 0.91884 0.76940 0.68964 Biso 1.000 H

TS-MS3/C3 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04597	0.18725	0.52212	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.07658	0.30776	0.49619	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28380	0.40328	0.86194	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13826	0.49264	0.80634	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25366	0.28163	0.06637	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17780	0.12719	0.29614	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04164	0.18693	0.73786	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15011	0.08581	0.19896	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15293	0.07185	0.40656	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.06281	0.18087	0.62344	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25320	0.27873	0.86392	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35829	0.27114	0.84190	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23610	0.05245	0.16399	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47865	0.20508	0.14310	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05041	0.41306	0.53288	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16469	0.21193	0.79260	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26013	0.51965	0.07436	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37207	0.08033	0.19155	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24801	0.40374	0.08352	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00683	0.29204	0.75968	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39616	0.10435	0.30634	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12940	0.16295	0.47372	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09358	0.44800	0.64493	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36841	0.06614	0.40414	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28932	0.10276	0.44446	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39580	0.31932	0.08159	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04572	0.41678	0.74073	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.49095	0.29235	0.87045	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.15998	0.18355	0.14187	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.93888	0.62767	0.40449	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.71830	0.52072	0.86487	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58977	0.95387	0.73928	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.73828	0.63904	0.84647	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96583	0.75504	0.16766	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81726	0.83488	0.12567	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56651	0.91842	0.62505	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.84663	0.86684	0.48040	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91958	0.60791	0.28848	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59947	0.96082	0.52806	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68297	0.92854	0.48999	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57813	0.71564	0.83438	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80679	0.85307	0.77935	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93662	0.63367	0.18841	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48538	0.74615	0.06613	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.91785	0.83660	0.41137	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90527	0.71998	0.45048	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69575	0.63782	0.06127	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49270	0.90747	0.47053	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71875	0.75453	0.85883	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81930	0.96078	0.64121	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82681	0.54818	0.14147	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82005	0.96422	0.74294	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.91963	0.84905	0.20425	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.82131	0.96513	0.52351	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.86561	0.81772	0.31038	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85242	0.49137	0.44695	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48935	0.83526	0.79663	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72174	0.76120	0.06247	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61563	0.76221	0.09427	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72293	0.98117	0.77639	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81121	0.44971	0.61112	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48089	0.11970	0.45453	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65637	0.08985	0.52724	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81920	0.40271	0.51936	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70371	0.30359	0.49356	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58992	0.43796	0.86974	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52616	0.21943	0.79431	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72582	0.52722	0.06238	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92298	0.10590	0.49543	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81453	0.41331	0.72345	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90545	0.36170	0.52441	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59098	0.18198	0.73364	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57110	0.06755	0.76634	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59383	0.17380	0.52858	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93171	0.06049	0.77869	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77088	0.48868	0.78893	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49182	0.29200	0.07268	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60390	0.40017	0.08916	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71847	0.26723	0.73564	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94710	0.43754	0.75436	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54482	0.17202	0.63779	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.47439	0.76311	0.95134	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77293	0.51822	0.95438	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.75269	0.81036	0.96705	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38775	0.86264	0.18783	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.38534	0.96687	0.15411	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38133	0.86033	0.39465	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47951	0.73697	0.85209	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37149	0.63119	0.82216	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26762	0.76049	0.18544	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03098	0.98704	0.18885	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17622	0.52554	0.13821	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14044	0.53083	0.46910	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03249	0.61655	0.15314	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43383	0.88193	0.28442	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13838	0.57930	0.30852	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31180	0.93680	0.40998	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15981	0.62598	0.40455	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.28394	0.71845	0.41434	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38183	0.60969	0.09904	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25460	0.51394	0.86769	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05074	0.93390	0.40860	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46701	0.84476	0.12656	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.08236	0.67256	0.42796	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15358	0.62261	0.19610	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.20836	0.22904	0.95730	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.48921	0.24305	0.97920	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23312	0.53973	0.97844	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.93153	0.73297	0.59189	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.46269	0.44635	0.69247	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.47369	0.48417	0.75771	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.37283	0.39624	0.68031	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.49610	0.39002	0.69447	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.57115	0.56104	0.24681	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.54590	0.45701	0.39101	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.58601	0.38891	0.34152	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.51696	0.43948	0.47989	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.50146	0.33990	0.53044	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.49292	0.51571	0.52637	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.52054	0.53998	0.62442	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.47633	0.59491	0.47704	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.46005	0.67915	0.52830	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.50802	0.61291	0.38432	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.51066	0.70805	0.33411	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.54058	0.54437	0.34336	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.56146	0.48576	0.21634	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.65861	0.62675	0.24016	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.52033	0.58634	0.20935	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.66241	0.44405	0.30496	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.52427	0.33352	0.29311	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.60543	0.33872	0.38498	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.42058	0.29874	0.56407	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.56581	0.36066	0.58042	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.50053	0.27985	0.48453	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.49915	0.60245	0.64436	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.54063	0.74442	0.55246	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.40467	0.64284	0.58518	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.42314	0.71534	0.48687	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.57586	0.73992	0.28368	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.52948	0.77784	0.37753	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.43098	0.68193	0.30064	Biso	1.000	H
C14	1.0000	0.33801	0.46107	0.48953	Biso	1.000	C
H21	1.0000	0.32799	0.40755	0.43363	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.31221	0.41541	0.55203	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.29446	0.50737	0.48132	Biso	1.000	H
C15	1.0000	0.64989	0.59943	0.62690	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.94717	0.72415	0.65361	Biso	1.000	O
H24	1.0000	0.67936	0.63413	0.69257	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.68141	0.54295	0.61240	Biso	1.000	H
H26	1.0000	0.68754	0.66796	0.57891	Biso	1.000	H

H27 1.0000 0.92562 0.77065 0.68673 Biso 1.000 H

TS9-10/C3 in HMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04999	0.18497	0.51904	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08196	0.30825	0.51017	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.27321	0.39958	0.85326	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14928	0.50351	0.79079	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25786	0.28050	0.05638	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.18762	0.13894	0.27920	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.06098	0.18653	0.72466	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15446	0.08405	0.18608	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.16191	0.08236	0.38872	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08201	0.16272	0.61303	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26694	0.28480	0.85190	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.38175	0.30226	0.82196	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24017	0.04816	0.15593	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47925	0.20102	0.13409	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05178	0.41561	0.52361	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.17823	0.20548	0.78485	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25817	0.51482	0.06397	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37615	0.07624	0.18411	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23646	0.39455	0.06617	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.04130	0.30279	0.73457	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40485	0.09658	0.29872	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11772	0.16168	0.45043	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07918	0.46621	0.63426	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37360	0.06522	0.39740	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29281	0.10406	0.42977	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39712	0.32259	0.08815	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.05359	0.42039	0.73042	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.50025	0.30061	0.86320	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15691	0.17156	0.12060	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.94729	0.63086	0.40432	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.73804	0.52653	0.86709	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59555	0.95446	0.73457	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.75670	0.64501	0.84949	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96417	0.74811	0.15822	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82050	0.83727	0.12506	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56522	0.91898	0.62092	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.87221	0.88756	0.46891	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.93403	0.61739	0.28846	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.60319	0.96157	0.52461	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68861	0.92799	0.49250	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58987	0.71494	0.82453	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.82049	0.86249	0.78938	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93877	0.62989	0.18665	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48737	0.73685	0.06461	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.93661	0.84778	0.40073	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.93304	0.73826	0.44964	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69953	0.63567	0.06953	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49969	0.90943	0.46372	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.72756	0.75490	0.86082	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82800	0.93773	0.63828	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82435	0.53876	0.14964	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.83021	0.96454	0.73832	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92428	0.84547	0.19847	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82842	0.96724	0.52212	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87190	0.81060	0.30528	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84123	0.50311	0.45140	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.50190	0.83720	0.79687	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72098	0.75721	0.06772	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61517	0.75547	0.10339	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73329	0.98617	0.76160	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.83418	0.45588	0.61407	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48323	0.12316	0.45224	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65978	0.09109	0.52255	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82268	0.41026	0.51749	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70271	0.31209	0.50253	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.61077	0.44139	0.85970	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52143	0.21090	0.79397	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72823	0.52474	0.06795	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92135	0.11256	0.50551	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82381	0.41176	0.72634	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90928	0.37139	0.50079	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58999	0.17985	0.73160	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57760	0.06798	0.76360	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59605	0.17498	0.52646	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.94117	0.06805	0.76620	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.80319	0.50230	0.79577	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49095	0.29387	0.07076	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60448	0.39885	0.08899	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71532	0.27105	0.73427	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94420	0.41222	0.76378	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54420	0.16826	0.63572	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.49287	0.75995	0.94898	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.78104	0.52024	0.96070	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74450	0.80215	0.97082	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38783	0.85787	0.18145	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.38971	0.96333	0.14532	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38553	0.85792	0.38912	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.49239	0.73639	0.84872	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.38254	0.63223	0.81993	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26592	0.75868	0.17983	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03596	0.98287	0.18441	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17875	0.52345	0.13094	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.15287	0.52097	0.45582	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03084	0.60926	0.14798	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43455	0.87822	0.27780	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13834	0.57859	0.30164	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31811	0.93639	0.40849	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16475	0.61920	0.39900	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.28573	0.71714	0.40745	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38216	0.59743	0.08878	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25795	0.51822	0.85940	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06753	0.94158	0.38662	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46324	0.83403	0.12063	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.08218	0.65555	0.43389	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15471	0.61950	0.18933	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23653	0.23128	0.94532	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.48364	0.25255	0.97361	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23333	0.54335	0.96977	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.91942	0.74338	0.55803	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.61368	0.53186	0.66436	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.68428	0.57646	0.70943	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.53844	0.50231	0.70413	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.61924	0.46230	0.63599	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.53916	0.54231	0.27699	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.48081	0.42476	0.41662	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.52779	0.35963	0.37175	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.43045	0.39904	0.50130	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.41110	0.29809	0.55435	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.39944	0.47229	0.54044	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.62552	0.61395	0.59619	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.42397	0.57357	0.49866	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.40163	0.65279	0.55220	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.47073	0.59648	0.41281	Biso	1.000	C
C12	1.0000	0.50504	0.70348	0.36319	Biso	1.000	C
C13	1.0000	0.49379	0.51940	0.37082	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.52371	0.46656	0.24291	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.62981	0.60044	0.27603	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.50108	0.58020	0.23715	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.61157	0.41583	0.34570	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.47648	0.31121	0.31550	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.53525	0.30268	0.41614	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.32211	0.23861	0.56287	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.44660	0.32044	0.62094	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.44635	0.25299	0.52245	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.60246	0.67555	0.61555	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.44622	0.67363	0.61560	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.31334	0.61598	0.56897	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.42622	0.73029	0.51845	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.58780	0.73675	0.33328	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.51010	0.76804	0.40634	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.44705	0.69048	0.30901	Biso	1.000	H
C14	1.0000	0.33900	0.44418	0.62845	Biso	1.000	C
H21	1.0000	0.32595	0.36598	0.65571	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.38316	0.50929	0.67818	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.25736	0.43730	0.62046	Biso	1.000	H
C15	1.0000	0.68835	0.63323	0.52093	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.87786	0.72984	0.61608	Biso	1.000	O
H24	1.0000	0.77770	0.68690	0.57637	Biso	1.000	H
H25	1.0000	0.70463	0.56895	0.49638	Biso	1.000	H
H26	1.0000	0.69665	0.69585	0.47369	Biso	1.000	H

H27 1.0000 0.89447 0.80314 0.63771 Biso 1.000 H

TS1-2 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05533	0.18081	0.53048	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09029	0.30544	0.52328	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29448	0.40065	0.82807	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14600	0.48845	0.79910	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.27064	0.28348	0.07242	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16819	0.12255	0.28361	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04788	0.17542	0.73668	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15744	0.07051	0.19034	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15690	0.07472	0.39567	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08037	0.15656	0.62647	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26476	0.28005	0.85494	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35923	0.25937	0.82259	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.25007	0.03867	0.17702	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48844	0.19401	0.13985	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05383	0.40890	0.53215	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15480	0.19333	0.81004	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25858	0.49929	0.07306	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38954	0.07347	0.19681	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.25382	0.39385	0.11265	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02281	0.28927	0.74229	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.42293	0.09974	0.31091	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12720	0.16002	0.46433	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07326	0.45745	0.64317	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37761	0.07115	0.40733	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29604	0.11312	0.42805	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40933	0.31989	0.10187	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04653	0.41156	0.73940	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48445	0.27566	0.86762	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.17048	0.15749	0.11970	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93173	0.61441	0.40299	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71305	0.50816	0.85413	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58360	0.93538	0.73070	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.72324	0.62151	0.83073	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96561	0.73340	0.16954	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82214	0.82082	0.12238	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56269	0.88529	0.61950	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86084	0.87360	0.47334	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.88855	0.58255	0.29018	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59835	0.94846	0.52909	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69271	0.93601	0.48585	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57197	0.70639	0.83574	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80339	0.84517	0.78321	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93001	0.61100	0.19290	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.49104	0.73751	0.06761	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.93098	0.83916	0.40618	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91736	0.72186	0.44769	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69644	0.62033	0.06786	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49739	0.90064	0.46641	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71180	0.73957	0.85655	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81549	0.93600	0.63867	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.83436	0.52883	0.13119	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81668	0.95307	0.73972	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92621	0.83495	0.19889	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82706	0.96367	0.52236	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87707	0.81672	0.30630	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84052	0.49341	0.46445	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48478	0.82612	0.79676	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72262	0.74345	0.06370	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61797	0.74594	0.09704	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71960	0.97274	0.76794	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82056	0.41750	0.61864	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47800	0.13025	0.47111	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.64165	0.07448	0.54683	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82159	0.39137	0.51875	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70669	0.29267	0.49120	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58654	0.41922	0.85921	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52013	0.18866	0.80921	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.73132	0.51431	0.05621	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92837	0.10841	0.50964	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81410	0.39026	0.73335	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.91354	0.36066	0.49975	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58989	0.17054	0.73862	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.55841	0.04702	0.74299	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59506	0.17182	0.53757	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92725	0.05340	0.77213	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77056	0.47877	0.77988	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49500	0.28333	0.07495	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.61352	0.38473	0.08061	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71709	0.24728	0.75675	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94348	0.41560	0.77493	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.56153	0.19909	0.64539	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.49998	0.78459	0.95683	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77113	0.51416	0.94395	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74990	0.78609	0.96645	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38714	0.84875	0.19088	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40834	0.96351	0.15813	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37459	0.85314	0.40451	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48168	0.73774	0.86091	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36627	0.63306	0.85111	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26429	0.75929	0.16922	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04288	0.96650	0.17539	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18238	0.52657	0.12884	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14832	0.51626	0.46281	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02936	0.59171	0.17754	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.40908	0.85170	0.29192	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.18645	0.59354	0.30830	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31892	0.94251	0.42105	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16880	0.61729	0.40589	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27659	0.71912	0.44211	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38173	0.59664	0.07457	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25486	0.49808	0.86473	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06397	0.93365	0.40350	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46974	0.82199	0.14287	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07129	0.64136	0.41229	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16509	0.61932	0.19701	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.25157	0.26671	0.95655	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46825	0.23342	0.97977	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21292	0.47483	0.97674	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.87110	0.70697	0.56236	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.66185	0.58698	0.58054	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.83475	0.68800	0.62167	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.63817	0.63539	0.62204	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.66718	0.51878	0.60994	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.69152	0.61440	0.51411	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.84315	0.75792	0.64406	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.58678	0.37266	0.34055	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.51681	0.41322	0.48327	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.51479	0.34113	0.51366	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.48430	0.47750	0.53602	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.42452	0.43174	0.62333	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.47873	0.56639	0.49353	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.44847	0.61316	0.53120	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.51143	0.59472	0.40578	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.50286	0.68775	0.36205	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.55037	0.53341	0.35702	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.58885	0.56683	0.26329	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.55135	0.44069	0.39550	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.53543	0.34173	0.28092	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.57915	0.30183	0.37700	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.67365	0.42254	0.31902	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.43283	0.49790	0.66790	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.45470	0.38236	0.65773	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.33522	0.37650	0.61054	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.45226	0.65849	0.30167	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.58473	0.75773	0.34355	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.46372	0.71857	0.40744	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.64499	0.53752	0.24256	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.63180	0.65719	0.25567	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.51760	0.53109	0.21733	Biso	1.000	H

TS2-3 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
 _symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04821	0.17276	0.51989	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.06599	0.28434	0.48089	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29198	0.39642	0.83346	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.15088	0.48714	0.78500	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26438	0.27306	0.06294	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16809	0.10158	0.28324	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05628	0.17905	0.72441	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15548	0.06238	0.18539	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14591	0.04701	0.39377	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.10410	0.19491	0.61335	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26510	0.27432	0.84933	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36624	0.26478	0.81698	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24779	0.03298	0.16115	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48524	0.18347	0.12611	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04141	0.39106	0.51836	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16280	0.19097	0.79479	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26192	0.49998	0.06215	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38628	0.07146	0.19046	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24736	0.38690	0.09204	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01774	0.27989	0.75357	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.41101	0.11809	0.30202	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.10361	0.12693	0.45789	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07839	0.42526	0.63118	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37476	0.06336	0.39506	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28110	0.08059	0.43377	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40383	0.30831	0.08816	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04868	0.40194	0.73082	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.49305	0.28235	0.85813	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.16725	0.15856	0.12509	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.92723	0.60841	0.39443	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.71956	0.51299	0.85348	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.59907	0.94790	0.73396	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.73495	0.62390	0.81579	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95643	0.72596	0.15020	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82072	0.82320	0.11340	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.57187	0.92326	0.61960	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85799	0.86879	0.46123	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91453	0.59040	0.27838	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.60067	0.94912	0.51983	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68702	0.91635	0.49047	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58028	0.70600	0.82056	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81923	0.85380	0.79897	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93363	0.60838	0.17743	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.49042	0.73113	0.05765	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.91882	0.82215	0.39633	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.88570	0.69811	0.43927	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68935	0.61263	0.09205	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49197	0.88020	0.46672	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71533	0.73376	0.85304	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.80344	0.89119	0.63773	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82902	0.51603	0.12933	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82509	0.94225	0.73327	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.92266	0.82858	0.18798	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.82137	0.94568	0.52544	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.87145	0.80447	0.29493	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83716	0.47545	0.44004	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49558	0.82789	0.78826	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71369	0.73259	0.06915	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61398	0.74453	0.10196	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73639	0.97566	0.75714	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.83370	0.45172	0.60758	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47706	0.12181	0.45627	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65079	0.07618	0.50312	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81638	0.39297	0.51552	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.69361	0.29909	0.50668	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59206	0.42745	0.85817	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.53813	0.21199	0.78856	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72521	0.51118	0.05984	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92004	0.09124	0.53015	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82179	0.40156	0.71824	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.89646	0.34462	0.50720	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59753	0.16778	0.72897	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.58811	0.06232	0.77273	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59106	0.16049	0.52574	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.94226	0.04482	0.74027	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77874	0.47200	0.79010	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49252	0.27483	0.06340	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60943	0.37761	0.07289	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.72310	0.25645	0.71756	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94979	0.41897	0.75582	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54015	0.13822	0.63651	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.50964	0.77820	0.94627	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77155	0.53132	0.94743	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.72769	0.75039	0.96751	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38865	0.84166	0.18882	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.41467	0.96235	0.17320	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38274	0.84059	0.39079	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48964	0.73534	0.84929	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37359	0.63143	0.83767	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26063	0.76159	0.17976	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04066	0.96028	0.16712	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.20165	0.53483	0.12959	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.13206	0.51154	0.45860	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03343	0.59475	0.14771	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.42843	0.82928	0.28284	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.14919	0.57756	0.30233	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.33317	0.93621	0.38810	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15443	0.61278	0.40080	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27289	0.70919	0.42404	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38894	0.58703	0.05946	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25612	0.50013	0.85737	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05491	0.90457	0.39691	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.45241	0.81438	0.11869	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06892	0.65107	0.42102	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16097	0.61726	0.18962	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.24003	0.24290	0.94847	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47327	0.22879	0.96694	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21000	0.48941	0.96855	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.80192	0.66800	0.53014	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.66875	0.60852	0.60125	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.76796	0.66369	0.59092	Biso	1.000	O
H3	1.0000	0.79009	0.74070	0.60783	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.34477	0.42919	0.31075	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.35888	0.37499	0.26631	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.26592	0.37842	0.34596	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.33724	0.49097	0.27068	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.55439	0.55815	0.32239	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.45138	0.40079	0.42998	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.44215	0.32868	0.39359	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.46821	0.40797	0.51867	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.46484	0.31651	0.57481	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.48974	0.51038	0.56359	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.55465	0.54624	0.64008	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.44326	0.57450	0.52349	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.41488	0.64366	0.58382	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.42517	0.56506	0.43494	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.39520	0.61498	0.40221	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.44407	0.48832	0.37645	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.56871	0.50335	0.27859	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.62626	0.60179	0.36661	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.54854	0.62048	0.28150	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.54799	0.33790	0.59830	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.42926	0.23882	0.53802	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.41279	0.30248	0.63355	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.55549	0.61198	0.67967	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.56982	0.48783	0.67704	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.37028	0.67783	0.54851	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.48899	0.71254	0.61404	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.36142	0.59159	0.63808	Biso	1.000	H

TS3-4 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
 _symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04672	0.16650	0.51953	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08026	0.28889	0.49897	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.27178	0.38388	0.84883	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14589	0.48930	0.79033	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25455	0.26335	0.06149	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17372	0.10389	0.28540	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05209	0.17195	0.72770	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15473	0.06029	0.18867	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15096	0.04851	0.39552	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08102	0.15720	0.61625	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25833	0.26590	0.85337	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36828	0.27381	0.82115	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24754	0.03292	0.16123	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48355	0.18478	0.12875	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04772	0.39394	0.52154	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16422	0.18457	0.79115	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25526	0.49683	0.06647	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38544	0.06994	0.19133	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23364	0.37721	0.07881	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02929	0.28567	0.74327	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.41264	0.11396	0.30357	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11103	0.13222	0.45620	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08311	0.44335	0.63219	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37472	0.05642	0.39553	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28531	0.07879	0.43622	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39409	0.30274	0.08962	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.05029	0.40585	0.72980	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.49091	0.27857	0.85900	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15949	0.15281	0.12766	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93005	0.60442	0.39874	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.72456	0.50796	0.85677	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58826	0.93511	0.73483	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.73805	0.62417	0.83986	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95183	0.72287	0.15411	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81817	0.82412	0.12227	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.55899	0.90377	0.62085	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86154	0.86397	0.46943	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.92228	0.59027	0.28241	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59660	0.93710	0.52300	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68238	0.90263	0.49517	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58337	0.70459	0.82293	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81935	0.84678	0.79159	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93181	0.60621	0.18091	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48620	0.72301	0.06297	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92248	0.82081	0.40126	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.89663	0.69926	0.44353	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69920	0.62004	0.07241	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49293	0.87726	0.46287	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71941	0.73912	0.85897	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82302	0.91770	0.63941	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82267	0.51333	0.13806	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82393	0.94534	0.73900	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92007	0.82581	0.19466	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82338	0.94712	0.52344	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86945	0.80028	0.30164	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83544	0.47145	0.44245	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48746	0.81817	0.79386	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71751	0.74023	0.06772	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61124	0.73702	0.10425	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72279	0.95974	0.76280	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82293	0.43582	0.60817	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47785	0.10553	0.45641	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65266	0.06608	0.51394	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81588	0.38495	0.51425	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.69654	0.28688	0.49859	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59859	0.41952	0.84671	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51356	0.18815	0.79200	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72489	0.50782	0.06138	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91759	0.09297	0.50879	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81786	0.39758	0.72127	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90243	0.34440	0.50692	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58819	0.16081	0.73357	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.58073	0.05270	0.76942	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59258	0.15200	0.52661	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93115	0.05300	0.76566	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79363	0.48922	0.78570	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48908	0.27716	0.06804	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60089	0.38422	0.08482	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71172	0.25670	0.73688	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94378	0.40832	0.75633	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54403	0.14282	0.63686	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.49598	0.75755	0.94931	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76737	0.50210	0.95060	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.73750	0.78119	0.96991	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38675	0.83821	0.18532	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.41010	0.95852	0.17306	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38028	0.83572	0.38976	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48582	0.72422	0.85053	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37563	0.61614	0.83089	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26091	0.75507	0.16769	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04031	0.95584	0.17568	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18833	0.51797	0.13779	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.13715	0.50286	0.45085	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02940	0.59244	0.14506	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41959	0.82090	0.28061	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.14957	0.58628	0.30177	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.32694	0.92833	0.38557	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15589	0.60931	0.40250	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27320	0.70586	0.42797	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38238	0.58079	0.07751	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.24989	0.49813	0.86205	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05777	0.90685	0.39796	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.45931	0.81877	0.11813	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06772	0.64043	0.43166	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15690	0.61412	0.18743	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23014	0.21984	0.94921	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47952	0.23670	0.97051	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21550	0.51042	0.97299	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.85485	0.69012	0.54984	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.66754	0.60192	0.62126	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.83326	0.68773	0.61395	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.67502	0.60252	0.69205	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.66468	0.53454	0.58330	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.65420	0.66332	0.58789	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.85233	0.76433	0.62736	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.34185	0.43353	0.31022	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.35826	0.38343	0.26293	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.26396	0.37889	0.34530	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.33151	0.49575	0.27321	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.55025	0.56701	0.32197	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.45218	0.40436	0.42579	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.45862	0.34244	0.38544	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.45283	0.39731	0.51522	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.45964	0.30509	0.56188	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.44967	0.48305	0.56966	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.47926	0.49390	0.65824	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.42051	0.56005	0.52722	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.39214	0.63007	0.58646	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.41952	0.56448	0.43761	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.40045	0.62309	0.40531	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.44155	0.49239	0.37626	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.56527	0.51574	0.27466	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.62298	0.60996	0.36543	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.54170	0.63016	0.28452	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.45588	0.24511	0.51407	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.39036	0.26089	0.60863	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.53710	0.33674	0.59994	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.47240	0.55294	0.70079	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.48999	0.43100	0.69183	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.36465	0.67855	0.54860	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.46355	0.68769	0.62674	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.32519	0.57692	0.63252	Biso	1.000	H

TS4-5 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
 _symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.06876	0.18102	0.51582	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.10475	0.30606	0.50888	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.30033	0.39736	0.81541	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.15953	0.49495	0.78095	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.27675	0.28623	0.05839	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.18030	0.11350	0.27326	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.06332	0.17578	0.72072	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.16465	0.07251	0.17592	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.16534	0.06740	0.38567	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.09512	0.15520	0.61076	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.27395	0.27798	0.84263	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.37380	0.26378	0.81520	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.25603	0.04215	0.15111	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.49687	0.20104	0.13198	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.06578	0.40794	0.51640	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16909	0.18908	0.79319	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26819	0.50529	0.05224	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.39323	0.07551	0.17977	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.26613	0.40207	0.09352	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.04680	0.29469	0.72391	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.41604	0.09437	0.29490	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.13707	0.15874	0.44728	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08757	0.46121	0.62582	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.38531	0.06809	0.39413	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.30148	0.10380	0.42382	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.41602	0.32181	0.08359	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.06187	0.41358	0.72153	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.49793	0.27503	0.85710	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.17619	0.16786	0.11489	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.94953	0.61750	0.38996	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.72840	0.51237	0.84466	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59598	0.93561	0.71384	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.73044	0.61856	0.80925	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96624	0.73613	0.15133	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82407	0.82784	0.11261	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.57809	0.89016	0.60190	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86800	0.86895	0.46401	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.92399	0.59299	0.27502	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.61247	0.95034	0.51056	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.71026	0.94215	0.46997	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58979	0.71421	0.82436	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.82077	0.85076	0.77377	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.94211	0.61700	0.17423	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.49756	0.74417	0.04303	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.93783	0.83643	0.39502	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91413	0.71266	0.43254	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69883	0.62165	0.07256	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.51233	0.89391	0.44701	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.72728	0.73979	0.84219	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82602	0.93662	0.62700	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.83636	0.52771	0.12544	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82909	0.95523	0.72801	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.93156	0.83962	0.18462	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.84041	0.96500	0.51118	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.88968	0.82202	0.29404	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.86420	0.49196	0.44790	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49190	0.81845	0.77008	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72973	0.74430	0.05209	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62478	0.75331	0.07058	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72960	0.97132	0.75618	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.83479	0.42536	0.60595	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.49350	0.13561	0.44814	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65017	0.07541	0.52496	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.83587	0.39121	0.50786	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.71825	0.29707	0.48102	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.60467	0.41704	0.85141	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52775	0.18724	0.79339	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.73708	0.51972	0.04912	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.94129	0.10912	0.49682	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82679	0.39182	0.72017	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.92098	0.35027	0.49383	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59765	0.16852	0.72320	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57149	0.04685	0.73130	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.60412	0.17301	0.52072	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93848	0.05929	0.75758	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79385	0.48160	0.77861	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.50286	0.28507	0.06194	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.62065	0.38741	0.06543	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.72451	0.24961	0.73889	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.95440	0.40817	0.75730	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.56461	0.18966	0.62933	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.50659	0.79460	0.93366	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.78458	0.53456	0.93751	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76753	0.77348	0.95395	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.39773	0.85564	0.17294	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.41668	0.96914	0.13924	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.39084	0.85337	0.38532	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.49353	0.73929	0.84126	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.38248	0.62915	0.83485	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27289	0.76636	0.16005	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04876	0.97071	0.15957	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19889	0.53708	0.11233	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.15220	0.51570	0.44333	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.04096	0.60415	0.14103	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.42955	0.86345	0.27245	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16666	0.58861	0.28940	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.33508	0.94046	0.41028	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.17487	0.61947	0.38898	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.29424	0.71397	0.41257	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39122	0.60187	0.04524	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26447	0.49860	0.84810	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.07183	0.92638	0.39700	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.47439	0.82540	0.12001	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.09137	0.65946	0.41219	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.17012	0.62476	0.17655	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.25237	0.26107	0.94355	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47901	0.22932	0.96871	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21479	0.47650	0.95845	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.83365	0.66886	0.51339	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.54214	0.42374	0.63080	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.78121	0.64065	0.56819	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.59189	0.39294	0.66298	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.54705	0.49079	0.67184	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.45526	0.35505	0.63135	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.77147	0.70344	0.58525	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.61196	0.75179	0.30103	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.58043	0.80953	0.30747	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.68535	0.78052	0.34290	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.63677	0.75271	0.23247	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.41676	0.58943	0.26731	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.48666	0.63011	0.42129	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.44908	0.68055	0.43605	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.49702	0.57090	0.48840	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.45553	0.58031	0.57952	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.54909	0.50292	0.47013	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.58434	0.45605	0.53620	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.57458	0.49113	0.37696	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.60808	0.40697	0.34958	Biso	1.000	C
C11	1.0000	0.56398	0.55368	0.31321	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.58339	0.54464	0.24480	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.52110	0.63135	0.32784	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.38700	0.64885	0.26776	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.34916	0.50823	0.28947	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.43917	0.58023	0.19990	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.41215	0.62787	0.57436	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.52382	0.62431	0.62708	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.39749	0.49874	0.60799	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.61614	0.40430	0.51004	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.69143	0.56135	0.54794	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.61094	0.40336	0.27734	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.54766	0.32367	0.37325	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.68957	0.42631	0.37462	Biso	1.000	H

TS5-6 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
 _symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.06661	0.18404	0.52309	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.10564	0.30995	0.52045	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.30378	0.40207	0.83075	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.15661	0.49147	0.79104	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26618	0.28483	0.06435	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.19038	0.12366	0.28359	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.06032	0.17701	0.72769	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.16535	0.07791	0.18748	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.16891	0.07398	0.39520	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08753	0.15221	0.61766	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26782	0.27902	0.85529	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36823	0.26117	0.84215	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.25507	0.04732	0.15766	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.49353	0.20680	0.14228	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.06874	0.41357	0.52571	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.17383	0.19697	0.79315	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.27144	0.51146	0.06169	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.39125	0.07987	0.18903	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.26440	0.40509	0.10123	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.03965	0.29344	0.73025	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.41245	0.09827	0.30448	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.13758	0.16388	0.45568	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08540	0.46426	0.63586	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.38427	0.06955	0.40381	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.30326	0.10727	0.43754	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40533	0.31400	0.07557	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.05839	0.41386	0.73073	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.49965	0.27774	0.86621	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.17016	0.17028	0.12644	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.94794	0.62057	0.40105	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.72648	0.51418	0.85161	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.59648	0.94023	0.72252	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.73238	0.62472	0.82391	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96927	0.74138	0.16169	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82917	0.83534	0.12055	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.57783	0.89026	0.61173	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.87438	0.87785	0.47263	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.92367	0.59710	0.28532	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.61164	0.95075	0.52042	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.70797	0.94129	0.47828	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58541	0.71324	0.83221	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81593	0.85032	0.77734	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.94199	0.62113	0.18448	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.49813	0.74740	0.05316	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.94089	0.84090	0.40393	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.92379	0.72217	0.44520	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.70141	0.63209	0.07510	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.50995	0.89676	0.45829	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.72480	0.74493	0.85152	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.83034	0.94682	0.63441	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.83518	0.53457	0.13497	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82936	0.95940	0.73575	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.93191	0.84259	0.19616	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.84112	0.97038	0.51769	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.88621	0.81917	0.30457	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85518	0.49549	0.45794	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49346	0.82514	0.78095	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.73234	0.75561	0.06025	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62856	0.76527	0.08371	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73074	0.97672	0.76394	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.83304	0.42327	0.61401	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.49428	0.13262	0.45647	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.65241	0.07644	0.53614	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.83590	0.39476	0.51452	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.72094	0.29645	0.48692	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.60229	0.41920	0.84573	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51657	0.18532	0.79656	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.73394	0.52477	0.05976	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.93986	0.11514	0.50041	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82560	0.39628	0.72947	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.92692	0.36279	0.49681	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59522	0.17300	0.73083	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57267	0.05239	0.73751	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.60662	0.17395	0.52808	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93934	0.05963	0.76979	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79864	0.49237	0.78536	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.50382	0.29079	0.07052	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.61256	0.40088	0.08806	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71963	0.25678	0.75333	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.95200	0.41007	0.76729	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.56872	0.19672	0.63544	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.50714	0.79632	0.94330	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77226	0.52246	0.94718	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76653	0.78872	0.96169	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.39514	0.85975	0.18381	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.41509	0.97335	0.14904	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.39075	0.85667	0.39338	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.49193	0.74242	0.85017	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37850	0.63501	0.84173	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26835	0.77299	0.17817	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04882	0.97552	0.17733	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.20850	0.54917	0.12352	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.16209	0.51887	0.45393	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03897	0.60498	0.15102	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43511	0.87130	0.28157	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16129	0.58559	0.29950	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.33174	0.94131	0.41713	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.17425	0.61860	0.39886	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.29264	0.71763	0.41779	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39656	0.60303	0.05271	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26426	0.50240	0.85862	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.07442	0.93317	0.40066	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46423	0.82350	0.12711	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.08624	0.65078	0.42662	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16909	0.62862	0.18802	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22442	0.25411	0.95199	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.50693	0.24290	0.97776	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21527	0.48580	0.96893	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.87638	0.70565	0.55558	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.68335	0.56514	0.57833	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.71786	0.51570	0.55462	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.67588	0.62221	0.53412	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.65153	0.55400	0.64515	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.61157	0.75134	0.31577	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.55984	0.55215	0.32754	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.59268	0.55153	0.26198	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.55266	0.47781	0.38872	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.58860	0.39543	0.36190	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.50498	0.47430	0.47761	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.50625	0.40059	0.53987	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.46571	0.55389	0.49532	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.41940	0.56293	0.58429	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.47677	0.62725	0.43139	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.45093	0.68725	0.44698	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.51822	0.63148	0.33951	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.64075	0.75312	0.24839	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.68225	0.77858	0.36048	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.58112	0.81022	0.31980	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.51825	0.31019	0.36389	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.65416	0.39875	0.40380	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.62041	0.41218	0.29400	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.54358	0.35268	0.51649	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.47328	0.56995	0.64010	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.33677	0.49059	0.59691	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.41032	0.63696	0.58496	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.41843	0.59253	0.27418	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.44545	0.58510	0.20789	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.34890	0.51106	0.29356	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.38958	0.65272	0.27288	Biso	1.000	H
C13	1.0000	0.44055	0.35213	0.62363	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.84024	0.68257	0.61531	Biso	1.000	O
H20	1.0000	0.49586	0.36279	0.67919	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.38710	0.38491	0.64312	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.38788	0.26168	0.61409	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.83772	0.74733	0.63811	Biso	1.000	H

TS-MS1/C2 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
 _symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05648	0.19503	0.53069	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09523	0.32046	0.51838	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29616	0.41008	0.82672	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14004	0.49245	0.81037	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26276	0.29443	0.07335	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17353	0.13227	0.28639	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05020	0.18790	0.73634	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15453	0.08279	0.19135	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15387	0.08042	0.39805	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08792	0.17585	0.62604	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26401	0.28975	0.85650	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35913	0.26744	0.83050	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24587	0.05140	0.16916	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48552	0.21179	0.14936	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05478	0.42012	0.53798	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15685	0.20349	0.80861	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26548	0.51811	0.07690	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38320	0.08584	0.19776	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24576	0.40521	0.11314	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01988	0.29819	0.74342	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40754	0.10509	0.31282	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11992	0.16603	0.46215	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08999	0.47231	0.64808	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37466	0.08128	0.41197	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29017	0.11768	0.43809	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40129	0.33039	0.10155	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04839	0.42216	0.74225	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.48508	0.28461	0.87415	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.16240	0.17165	0.12463	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.93307	0.62928	0.40467	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.71008	0.52307	0.86054	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58927	0.95090	0.73403	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.70953	0.62747	0.82474	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95605	0.74525	0.16499	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81611	0.84167	0.12817	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56611	0.90071	0.62287	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86597	0.89362	0.47152	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.89540	0.60053	0.29065	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59873	0.95875	0.53049	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69652	0.95060	0.48968	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57918	0.73389	0.85234	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80835	0.85854	0.78858	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92638	0.62512	0.19144	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48399	0.74994	0.06626	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.92935	0.84804	0.40784	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90959	0.72971	0.45016	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68625	0.63600	0.09100	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49753	0.89843	0.46760	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71471	0.75142	0.85916	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81759	0.94596	0.64205	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82544	0.53831	0.13649	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82050	0.96452	0.74281	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.92155	0.84815	0.20043	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.83042	0.97781	0.52715	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.87417	0.82526	0.30810	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85623	0.49920	0.45878	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48726	0.84489	0.80031	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72266	0.75942	0.06648	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62046	0.77552	0.07876	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72387	0.98485	0.77150	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81968	0.44432	0.62032	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48184	0.15036	0.46674	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63429	0.08349	0.54168	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82459	0.40418	0.52536	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70805	0.30756	0.49803	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58651	0.42767	0.86808	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52154	0.20126	0.81156	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72250	0.53231	0.06533	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92783	0.12450	0.51746	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81544	0.41073	0.73388	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90928	0.36112	0.52182	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59061	0.18403	0.73965	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56712	0.06351	0.74814	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59306	0.18494	0.53845	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93182	0.06533	0.77304	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77635	0.49201	0.79636	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49011	0.29612	0.07995	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60649	0.40036	0.08499	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71755	0.26640	0.75186	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94442	0.42887	0.76935	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55292	0.20198	0.64656	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45751	0.77399	0.95634	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76632	0.54643	0.95344	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76417	0.78466	0.96920	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38582	0.86397	0.19272	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40653	0.97839	0.15991	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37617	0.86352	0.40651	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47555	0.74872	0.85915	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37317	0.64086	0.82514	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26191	0.77449	0.17558	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03893	0.97971	0.17943	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18375	0.54580	0.12439	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.13235	0.52833	0.46277	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02629	0.60880	0.16829	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41272	0.86851	0.29329	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16909	0.59757	0.30615	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.32475	0.95415	0.43066	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16197	0.63026	0.40383	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27941	0.72398	0.43425	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38919	0.60882	0.09612	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26261	0.51260	0.86085	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06378	0.93865	0.40152	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46622	0.83630	0.14221	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07846	0.67254	0.41242	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15916	0.63271	0.19434	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.24316	0.27785	0.95771	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46756	0.24118	0.98649	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.24281	0.51092	0.97617	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.88377	0.72010	0.58259	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.48603	0.33359	0.51494	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.61963	0.78370	0.31155	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.59561	0.59127	0.34210	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.64736	0.60194	0.28472	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.56060	0.49959	0.39629	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.58695	0.41112	0.36757	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.49759	0.48860	0.47648	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.47614	0.39985	0.54440	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.46172	0.56460	0.49328	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.39493	0.56211	0.57357	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.49135	0.65353	0.43205	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.47227	0.71783	0.44967	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.56213	0.67225	0.35737	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.63662	0.77518	0.24254	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.69968	0.83492	0.34439	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.57174	0.82644	0.31542	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.50969	0.33425	0.35100	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.62901	0.39051	0.41864	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.63983	0.43771	0.30856	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.38951	0.36001	0.56768	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.45029	0.61028	0.62845	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.33991	0.47747	0.59790	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.34415	0.60013	0.55811	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.40888	0.59561	0.32090	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.43779	0.61743	0.25303	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.37201	0.50686	0.33330	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.35544	0.62906	0.33797	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.55609	0.45100	0.62425	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.86726	0.69763	0.64471	Biso	1.000	O
H18	1.0000	0.54284	0.38459	0.67017	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.64346	0.49456	0.60325	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.54138	0.51086	0.66046	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.86576	0.75970	0.67335	Biso	1.000	H

TS-MS2/C2 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05377	0.19491	0.52801	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09231	0.32026	0.51309	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29999	0.41361	0.82870	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13766	0.48803	0.81376	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25939	0.29252	0.07229	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17056	0.13032	0.28751	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04604	0.18849	0.73667	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15320	0.08186	0.19210	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15218	0.07853	0.39929	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08036	0.17730	0.62526	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26327	0.29130	0.85604	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35694	0.26631	0.83134	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24533	0.05161	0.17015	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48410	0.21107	0.14771	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05380	0.42009	0.53976	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15750	0.20878	0.80482	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26624	0.51785	0.07920	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38281	0.08599	0.19784	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24303	0.40300	0.11374	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01192	0.29617	0.74533	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40842	0.10826	0.31268	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12297	0.16746	0.46406	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09847	0.47088	0.64923	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37476	0.08179	0.41153	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28909	0.11641	0.43816	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39782	0.32753	0.09912	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04876	0.42246	0.74252	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48426	0.28425	0.87238	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.16064	0.17058	0.12547	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93180	0.62789	0.40407	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.70930	0.52364	0.85943	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58914	0.95168	0.73635	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.70679	0.62737	0.82465	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95439	0.74350	0.16642	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81592	0.84133	0.12804	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56444	0.89971	0.62561	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86043	0.88786	0.47366	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.89048	0.59692	0.29079	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59593	0.95566	0.53235	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69274	0.94610	0.49119	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57658	0.73279	0.85556	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80401	0.85665	0.78608	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92422	0.62305	0.19202	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48300	0.74702	0.06940	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92589	0.84533	0.40944	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90506	0.72575	0.45035	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68567	0.63645	0.08965	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49360	0.89419	0.47080	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71289	0.75157	0.85937	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81995	0.95216	0.64212	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82444	0.53728	0.13543	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82021	0.96569	0.74324	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92047	0.84712	0.20102	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82839	0.97656	0.52624	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87363	0.82496	0.30881	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.86437	0.49750	0.45913	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48933	0.84925	0.80667	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72347	0.76012	0.06513	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62168	0.77721	0.07512	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72469	0.98734	0.77226	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.80943	0.44182	0.61909	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48147	0.15044	0.46703	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63235	0.08090	0.54153	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82360	0.40195	0.52651	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70973	0.30553	0.49369	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58635	0.42657	0.86390	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51937	0.20036	0.80921	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72093	0.53194	0.06504	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92630	0.12259	0.50999	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81533	0.41401	0.73290	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90706	0.35749	0.53249	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59283	0.18675	0.73924	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57064	0.06675	0.74681	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59429	0.18460	0.53694	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93197	0.06400	0.77615	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77963	0.49732	0.79586	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48856	0.29564	0.07862	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60377	0.40118	0.08546	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71871	0.27042	0.75537	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94790	0.43734	0.76312	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55860	0.20623	0.64527	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45115	0.76701	0.95963	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76339	0.54501	0.95300	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76711	0.78572	0.96826	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38499	0.86314	0.19352	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40497	0.97746	0.16108	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37533	0.86241	0.40685	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47334	0.74857	0.86184	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37100	0.64359	0.82319	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26097	0.77349	0.17698	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03828	0.97807	0.17958	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18305	0.54543	0.12450	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.12441	0.52987	0.46435	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02474	0.60708	0.17056	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41261	0.86795	0.29398	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16837	0.59559	0.30684	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.32520	0.95450	0.42895	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15966	0.63138	0.40324	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27737	0.72309	0.43472	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38928	0.60674	0.10248	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26373	0.51449	0.86211	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06030	0.93728	0.40547	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46546	0.83624	0.14245	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07891	0.67743	0.40723	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15834	0.63163	0.19506	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23772	0.27600	0.95669	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46923	0.24230	0.98480	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.24789	0.51396	0.97784	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.88930	0.72005	0.58555	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.48792	0.33296	0.50382	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.62044	0.78933	0.30353	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.60642	0.60295	0.33818	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.66679	0.61827	0.28629	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.56796	0.50465	0.39025	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.60226	0.42179	0.36134	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.49943	0.48668	0.46408	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.47394	0.39724	0.53211	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.45261	0.55863	0.47555	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.39128	0.55940	0.55875	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.48830	0.65211	0.41662	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.46015	0.71029	0.43160	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.57224	0.68011	0.35169	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.64134	0.78159	0.23555	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.69805	0.85015	0.33578	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.56394	0.82260	0.30384	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.52891	0.34462	0.33878	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.64049	0.39915	0.41426	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.66110	0.45440	0.30621	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.38535	0.35488	0.55048	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.45296	0.60720	0.61009	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.33551	0.47591	0.58467	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.34341	0.60126	0.54671	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.34969	0.51808	0.37755	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.38061	0.48456	0.32714	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.28414	0.45416	0.41865	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.32189	0.57298	0.35130	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.54682	0.44582	0.61624	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.88177	0.70135	0.64859	Biso	1.000	O
H18	1.0000	0.52868	0.37796	0.66226	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.63575	0.48862	0.59994	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.53026	0.50550	0.65071	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.87242	0.75923	0.67682	Biso	1.000	H

TS-MS3/C2 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05434	0.19238	0.53116	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09023	0.31743	0.51991	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29982	0.41000	0.82801	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14057	0.48897	0.81131	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26377	0.29238	0.07398	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16326	0.12840	0.28806	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04530	0.18715	0.73824	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15342	0.07999	0.19332	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15140	0.07893	0.39990	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08076	0.17233	0.62784	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26308	0.28808	0.85675	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35450	0.26085	0.82875	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24750	0.05081	0.17794	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48457	0.20880	0.14734	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05115	0.41828	0.53911	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15354	0.20545	0.80971	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26469	0.51454	0.07891	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38603	0.08479	0.20009	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24325	0.40060	0.11429	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01408	0.29713	0.74331	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.41802	0.10937	0.31431	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12672	0.17022	0.46612	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08989	0.47216	0.64861	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37529	0.08073	0.41127	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29115	0.11950	0.43228	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40313	0.33101	0.10269	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04772	0.42263	0.74303	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48276	0.28419	0.87302	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.16476	0.16851	0.12486	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93107	0.62454	0.40166	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.70535	0.52087	0.85829	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58562	0.94893	0.73652	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.70878	0.62712	0.82243	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95659	0.74094	0.16667	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81701	0.83830	0.12881	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56035	0.89797	0.62543	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85649	0.88224	0.47360	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.88375	0.59210	0.28946	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59631	0.95848	0.53396	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69220	0.94716	0.49305	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57824	0.73182	0.85528	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80564	0.85719	0.78836	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92553	0.62017	0.19229	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48365	0.74497	0.07099	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92703	0.84393	0.41068	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91031	0.72544	0.44997	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68913	0.63275	0.09211	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49527	0.90452	0.47058	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71406	0.75016	0.86000	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81886	0.94892	0.64299	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.83127	0.53554	0.13067	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81837	0.96408	0.74391	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92258	0.84461	0.20082	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82680	0.97260	0.52689	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87756	0.82437	0.30910	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85620	0.49732	0.45985	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48760	0.84579	0.80717	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72371	0.75554	0.06724	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62071	0.77030	0.07903	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72097	0.98333	0.77179	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81532	0.43841	0.62039	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47683	0.14512	0.47290	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63648	0.08434	0.54731	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82151	0.40052	0.52498	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70506	0.30556	0.49531	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58029	0.42861	0.86587	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52545	0.20381	0.81353	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72424	0.52907	0.06391	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92770	0.11811	0.51130	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81454	0.40873	0.73440	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90564	0.35661	0.52219	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59270	0.18471	0.74128	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56458	0.06262	0.74834	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59261	0.18387	0.54041	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92846	0.06460	0.77671	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.76817	0.48605	0.79378	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49038	0.29502	0.07946	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60809	0.39750	0.08492	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.72026	0.26372	0.75413	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94663	0.43479	0.76997	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55706	0.20678	0.64867	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45435	0.76628	0.96074	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76237	0.54276	0.95070	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76517	0.78070	0.96977	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38654	0.86101	0.19411	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40515	0.97504	0.16189	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37379	0.86186	0.40752	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47460	0.74657	0.86279	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37299	0.64049	0.82502	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26358	0.77026	0.17493	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04010	0.97522	0.17728	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17900	0.53982	0.12269	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.13013	0.52576	0.46331	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02797	0.60543	0.17796	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41139	0.86518	0.29498	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.18188	0.59554	0.30711	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.32048	0.95256	0.42681	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16389	0.62742	0.40238	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27618	0.72382	0.43884	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38670	0.60524	0.10286	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26432	0.51145	0.86176	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06065	0.93837	0.41027	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46951	0.83654	0.14404	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07624	0.66524	0.40129	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16235	0.62876	0.19659	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.24417	0.27586	0.95820	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46590	0.24165	0.98543	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.24763	0.50939	0.97732	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.88600	0.71434	0.58485	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.47503	0.33076	0.49870	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.62485	0.79695	0.31140	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.60029	0.60531	0.33949	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.65746	0.62169	0.28474	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.55927	0.50578	0.38454	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.58688	0.41885	0.35370	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.48613	0.48526	0.45996	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.47032	0.39959	0.52916	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.44718	0.56281	0.47717	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.39095	0.56378	0.56362	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.49373	0.66428	0.42631	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.46772	0.72337	0.44376	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.57112	0.68820	0.36063	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.62373	0.78290	0.24033	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.71250	0.84582	0.33063	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.58420	0.84527	0.32473	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.51067	0.34179	0.33513	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.62865	0.39673	0.40437	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.64124	0.44846	0.29569	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.38799	0.36318	0.56013	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.45545	0.61606	0.61172	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.33998	0.48130	0.59293	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.33895	0.60154	0.55313	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.34023	0.44788	0.40293	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.36377	0.47819	0.33558	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.31777	0.36096	0.41119	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.27378	0.45944	0.42956	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.56164	0.45660	0.60098	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.87179	0.69311	0.64732	Biso	1.000	O
H18	1.0000	0.55331	0.39406	0.64918	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.64572	0.49593	0.57302	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.55368	0.52106	0.63659	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.86535	0.75299	0.67500	Biso	1.000	H

TS9-10/C2 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05268	0.19113	0.52996	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08689	0.31460	0.51363	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29393	0.40749	0.82524	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14188	0.49291	0.80437	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26244	0.29007	0.07234	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16558	0.12734	0.28465	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04939	0.18755	0.73510	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15238	0.07577	0.19079	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15050	0.07673	0.39594	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.09016	0.17882	0.62507	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26281	0.28739	0.85456	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35698	0.26508	0.82464	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24319	0.04190	0.17586	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47936	0.20361	0.14447	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04581	0.41356	0.53431	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15334	0.20069	0.80923	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25963	0.51047	0.07554	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38308	0.07988	0.19896	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23594	0.39533	0.10955	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01691	0.29610	0.74364	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.41428	0.10390	0.31336	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11350	0.15931	0.46113	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08057	0.46604	0.64430	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37162	0.07424	0.41027	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28640	0.11117	0.43207	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40200	0.33029	0.10172	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04613	0.42022	0.74019	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.48251	0.28406	0.87083	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.16533	0.16331	0.12079	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.93180	0.62509	0.40084	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.70869	0.52059	0.85793	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58607	0.94831	0.73496	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.71313	0.62807	0.82316	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95592	0.73839	0.16450	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81387	0.83425	0.13095	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56003	0.89850	0.62386	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86140	0.88656	0.47178	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.88193	0.59355	0.28994	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59654	0.96028	0.53288	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69359	0.94982	0.49313	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57887	0.72898	0.85253	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80785	0.85868	0.79293	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92405	0.61801	0.19249	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48109	0.73948	0.07104	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.92825	0.84429	0.40829	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91262	0.72700	0.45351	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68746	0.62815	0.09263	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49673	0.90719	0.46869	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71495	0.74941	0.86236	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81459	0.93290	0.64181	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82998	0.53179	0.13166	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81864	0.96070	0.74145	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.92091	0.84080	0.20037	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.82590	0.97180	0.52761	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.87522	0.81692	0.30876	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85480	0.50062	0.46244	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49050	0.84527	0.80688	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72098	0.75094	0.06957	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61750	0.76421	0.08144	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72343	0.98429	0.76686	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81231	0.43723	0.62093	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47268	0.13899	0.47247	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63668	0.08619	0.54678	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81741	0.40002	0.52434	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.69945	0.30852	0.49427	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58390	0.42745	0.86117	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52104	0.19918	0.81291	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72273	0.52480	0.06497	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92362	0.11786	0.52150	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81306	0.40485	0.73469	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.89909	0.35350	0.51959	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59008	0.18273	0.74068	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56263	0.06072	0.74596	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58975	0.18358	0.53905	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93079	0.06283	0.76762	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77517	0.49093	0.79229	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48784	0.29261	0.07840	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60650	0.39337	0.08526	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71738	0.26159	0.75629	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94380	0.42864	0.77026	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55757	0.20857	0.64818	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45760	0.76477	0.96011	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76210	0.53872	0.95134	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76352	0.77775	0.97225	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38423	0.85670	0.19311	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40541	0.97193	0.16159	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37303	0.85664	0.40691	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47596	0.74498	0.86197	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37318	0.63982	0.82471	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26101	0.76787	0.17229	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03652	0.97307	0.17751	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17734	0.53875	0.12137	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.12237	0.52274	0.46076	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02574	0.60189	0.18033	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.40749	0.85852	0.29391	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.18242	0.59625	0.30655	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31808	0.94628	0.42536	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16267	0.62631	0.40164	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27389	0.72052	0.44104	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38294	0.59868	0.09770	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26165	0.51104	0.85916	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06178	0.93507	0.40455	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46634	0.83098	0.14313	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07634	0.66669	0.39916	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16123	0.62682	0.19624	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.24704	0.27557	0.95607	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46485	0.24258	0.98317	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23956	0.50637	0.97415	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.91168	0.73167	0.56412	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.67667	0.53055	0.50382	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.61431	0.78499	0.32095	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.56716	0.58545	0.34171	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.61400	0.59387	0.28149	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.51676	0.48350	0.38667	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.52586	0.38820	0.34706	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.45590	0.47120	0.46647	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.64288	0.54383	0.56436	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.44285	0.56157	0.49523	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.37768	0.55356	0.57810	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.49410	0.66149	0.44772	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.48407	0.72952	0.47152	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.55755	0.67630	0.37106	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.61107	0.77002	0.24983	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.70257	0.83285	0.33870	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.57708	0.83651	0.33419	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.44341	0.32005	0.32773	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.56144	0.35312	0.39295	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.57837	0.41550	0.28780	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.59646	0.47186	0.60723	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.41810	0.54522	0.63809	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.29383	0.48054	0.57633	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.36985	0.62783	0.58617	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.39538	0.36028	0.51393	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.31291	0.30839	0.48475	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.43909	0.31334	0.50881	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.38285	0.36964	0.58427	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.67694	0.65073	0.59346	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.89060	0.72033	0.62922	Biso	1.000	O
H18	1.0000	0.77679	0.67370	0.61818	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.70556	0.71617	0.54347	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.63689	0.66138	0.65178	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.91582	0.79418	0.65433	Biso	1.000	H

TS-MS1/C3 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
 _symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04717	0.18176	0.53182	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08887	0.30821	0.52517	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29083	0.40324	0.83471	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13235	0.47985	0.81339	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25661	0.28519	0.07462	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17219	0.12513	0.28984	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04531	0.17475	0.73780	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15284	0.07624	0.19462	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14757	0.06960	0.40032	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.07270	0.15433	0.62649	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25975	0.28192	0.85984	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35926	0.26564	0.83647	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24570	0.04754	0.17078	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48422	0.20881	0.15392	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05275	0.41184	0.53972	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15786	0.19679	0.80577	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26586	0.51353	0.08009	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38242	0.08153	0.20128	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24063	0.39735	0.11222	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01804	0.28702	0.74326	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40512	0.10151	0.31655	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11236	0.15525	0.46298	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08481	0.46273	0.65042	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36799	0.06962	0.41427	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28258	0.10413	0.44188	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39554	0.32190	0.10176	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04294	0.40972	0.74372	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.48277	0.27511	0.87788	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.15759	0.16460	0.12896	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.92904	0.61925	0.41040	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.71315	0.51539	0.86528	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58618	0.94238	0.73806	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.70529	0.61653	0.83153	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95404	0.73864	0.16788	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81915	0.83867	0.12544	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56258	0.88901	0.62781	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85794	0.88247	0.47289	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.90969	0.59715	0.29396	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59233	0.94749	0.53563	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68721	0.93727	0.49110	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57197	0.72028	0.84958	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80042	0.84505	0.78422	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92709	0.61918	0.19323	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48298	0.74173	0.06885	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.92140	0.83784	0.40820	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90212	0.71977	0.45028	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68560	0.63314	0.08942	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48808	0.88896	0.47575	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.70896	0.74150	0.85872	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81508	0.94523	0.64320	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.81918	0.53173	0.14529	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81643	0.95581	0.74469	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.91879	0.84114	0.20200	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.82304	0.96829	0.52700	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.86624	0.81539	0.30837	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83940	0.48898	0.46129	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48364	0.83724	0.80446	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72247	0.75699	0.06600	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62197	0.77506	0.08258	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72074	0.97637	0.77595	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81268	0.43083	0.62267	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47319	0.13278	0.47238	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63032	0.07264	0.54846	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81784	0.39470	0.52627	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70358	0.29332	0.50021	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59259	0.41433	0.87113	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.50689	0.18368	0.81361	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72082	0.52742	0.06927	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91936	0.11474	0.51343	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81050	0.40173	0.73691	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90941	0.36104	0.51789	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58278	0.17438	0.74331	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56495	0.05576	0.74953	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58743	0.17294	0.54212	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92824	0.05314	0.77890	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.78510	0.49293	0.80009	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48690	0.29041	0.08269	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60148	0.39711	0.08701	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.70741	0.26102	0.76035	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.93685	0.41239	0.77034	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54850	0.19432	0.64945	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45561	0.76195	0.95842	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76858	0.53937	0.95856	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.75954	0.78241	0.96773	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38428	0.85843	0.19685	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40608	0.97354	0.16458	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37289	0.85459	0.40713	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47047	0.73820	0.86025	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36553	0.63277	0.82602	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25803	0.77143	0.18669	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03810	0.97188	0.18383	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19190	0.54611	0.13367	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14009	0.51720	0.46485	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02470	0.60326	0.16052	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41920	0.86479	0.29595	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.14882	0.58757	0.31029	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31575	0.94116	0.42662	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15576	0.61844	0.41010	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27532	0.71503	0.43186	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39212	0.59875	0.09698	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25596	0.50565	0.86521	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05587	0.92817	0.40187	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.45791	0.82617	0.14164	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06978	0.65385	0.43464	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15495	0.62808	0.19791	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23098	0.26194	0.95981	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46633	0.23303	0.99037	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23817	0.51098	0.98045	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.85697	0.70491	0.57544	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.55614	0.45904	0.64574	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.55728	0.39437	0.68642	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.64219	0.52217	0.63041	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.51924	0.49781	0.68620	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.61127	0.76680	0.30877	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.58394	0.57474	0.34687	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.62727	0.57673	0.28622	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.55187	0.48822	0.40615	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.56835	0.39309	0.37782	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.50171	0.48857	0.49121	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.48759	0.40308	0.56141	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.47118	0.56910	0.50630	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.41909	0.58451	0.58963	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.49412	0.65030	0.43896	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.47880	0.71770	0.45432	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.55627	0.66001	0.36074	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.62280	0.75151	0.24002	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.69393	0.81990	0.33718	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.56486	0.81113	0.31183	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.48827	0.31525	0.37741	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.62436	0.38141	0.42129	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.60262	0.40680	0.31076	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.52304	0.35499	0.53335	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.48418	0.64479	0.63407	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.36987	0.50807	0.62693	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.36518	0.61868	0.57275	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.39882	0.58338	0.33466	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.42116	0.59765	0.26487	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.36123	0.49594	0.35251	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.34979	0.62145	0.35272	Biso	1.000	H
C13	1.0000	0.36488	0.31739	0.58325	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.83221	0.68196	0.63650	Biso	1.000	O
H20	1.0000	0.36150	0.24747	0.61993	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.32519	0.35238	0.62465	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.31548	0.28439	0.52312	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.84363	0.74935	0.66572	Biso	1.000	H

TS-MS2/C3 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04078	0.18210	0.52683	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08235	0.30854	0.51469	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29369	0.40205	0.83311	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.12739	0.47284	0.81727	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.24474	0.28027	0.07018	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16472	0.12077	0.29002	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.03672	0.17529	0.73624	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14278	0.07364	0.19416	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14040	0.06501	0.40042	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.06328	0.15955	0.62381	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25023	0.27804	0.85995	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.34530	0.25140	0.84991	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23371	0.04341	0.16758	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47205	0.20287	0.15173	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04686	0.41054	0.54199	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15496	0.19940	0.79736	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26038	0.51057	0.08067	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.36972	0.07589	0.19861	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24161	0.39704	0.11453	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00331	0.28342	0.74506	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39292	0.09452	0.31378	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11014	0.15463	0.46305	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09400	0.46034	0.65155	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36316	0.06875	0.41320	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.27520	0.09930	0.44172	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.38345	0.30870	0.08297	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04082	0.40987	0.74369	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.47855	0.27263	0.87535	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.14814	0.16373	0.13015	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.92235	0.61643	0.40492	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.70114	0.51300	0.86039	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58100	0.94175	0.73759	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.69862	0.61731	0.82732	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.94566	0.73721	0.17111	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.80854	0.83528	0.12725	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.55768	0.88859	0.62723	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85130	0.87577	0.47924	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.88467	0.58541	0.29112	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.58496	0.94177	0.53295	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68197	0.93348	0.49063	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.56817	0.72251	0.85516	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.79417	0.84484	0.78257	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.91716	0.61624	0.19261	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.47592	0.74133	0.06894	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.91252	0.83332	0.41018	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.89284	0.71336	0.44891	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.67763	0.63092	0.08896	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48125	0.87615	0.47357	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.70502	0.74245	0.85895	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81188	0.95131	0.64331	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.81714	0.53200	0.13550	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81133	0.95688	0.74493	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.90899	0.83931	0.20391	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.81801	0.96661	0.52648	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.85745	0.81587	0.31061	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85303	0.48643	0.46081	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.47939	0.83777	0.80574	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71634	0.75463	0.06395	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61511	0.77278	0.07292	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71517	0.97613	0.77689	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.79867	0.43083	0.62100	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47109	0.14126	0.46662	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.61840	0.06636	0.53983	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81463	0.39154	0.52870	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70235	0.29287	0.49547	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.57882	0.41426	0.85842	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.50210	0.18492	0.80609	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.70980	0.52351	0.06817	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91390	0.11215	0.50582	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.80688	0.40459	0.73492	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90046	0.35022	0.53582	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58149	0.17622	0.73899	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56327	0.05751	0.74590	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58401	0.17266	0.53609	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92339	0.05285	0.78032	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77771	0.49234	0.79902	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48235	0.28590	0.07891	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59081	0.39658	0.09628	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.70562	0.26271	0.75906	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.93936	0.42459	0.76208	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55010	0.19644	0.64428	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.44183	0.75639	0.95862	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.74861	0.52948	0.95593	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76098	0.77987	0.96723	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.37815	0.85587	0.19343	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.39108	0.96741	0.16079	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.36779	0.85091	0.40582	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.46436	0.73746	0.86111	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36242	0.63177	0.82253	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25542	0.76158	0.17968	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.02692	0.97073	0.18404	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17326	0.53334	0.12517	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.11726	0.51989	0.46627	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.01885	0.60353	0.16770	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.40963	0.86352	0.29340	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.15264	0.58034	0.30697	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31794	0.94233	0.43132	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.14939	0.61929	0.40337	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.26886	0.71115	0.43052	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38158	0.60268	0.10548	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25604	0.50314	0.86355	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.04716	0.92410	0.40372	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46074	0.83409	0.14000	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06951	0.66625	0.41039	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.14914	0.62061	0.19519	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.20591	0.25897	0.95674	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.48505	0.23631	0.98696	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.24372	0.50738	0.97920	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.88034	0.71268	0.58591	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.56621	0.46681	0.62864	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.57019	0.40767	0.67425	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.65121	0.52618	0.60734	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.53390	0.51221	0.66615	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.59793	0.76497	0.29807	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.59064	0.58370	0.34106	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.64647	0.59430	0.28663	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.55832	0.49120	0.39891	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.59158	0.40745	0.37002	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.49807	0.48045	0.47693	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.48911	0.40078	0.55030	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.44971	0.55187	0.48572	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.39730	0.56600	0.56979	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.47792	0.63790	0.42049	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.44889	0.69589	0.43316	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.55618	0.66071	0.35190	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.64425	0.76351	0.24073	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.65432	0.83757	0.33807	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.52963	0.77727	0.27690	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.51698	0.32706	0.35585	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.63936	0.39234	0.41952	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.64141	0.43505	0.30948	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.52282	0.35138	0.52199	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.46425	0.61763	0.61636	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.34049	0.48775	0.60240	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.35241	0.61050	0.55556	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.33755	0.49821	0.39456	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.36437	0.45906	0.34574	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.27656	0.43916	0.44118	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.30627	0.54900	0.36565	Biso	1.000	H
C13	1.0000	0.37072	0.31570	0.58338	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.87229	0.69317	0.64877	Biso	1.000	O
H20	1.0000	0.37349	0.24610	0.61527	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.33953	0.35094	0.63297	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.31078	0.28115	0.52923	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.86645	0.75269	0.67778	Biso	1.000	H

TS-MS3/C3 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04575	0.18830	0.52665	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08296	0.31398	0.52026	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29872	0.40712	0.83125	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13705	0.48218	0.81025	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25049	0.28673	0.06897	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16873	0.12825	0.28705	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04283	0.18168	0.73294	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14922	0.07806	0.19227	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14683	0.07743	0.39882	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.07116	0.16214	0.62167	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25435	0.28312	0.85878	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.34804	0.25438	0.84864	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24023	0.04654	0.16991	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47548	0.20894	0.14910	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04623	0.41662	0.53851	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15812	0.20430	0.79714	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26345	0.51492	0.07874	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37774	0.08256	0.19903	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24221	0.40068	0.11333	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01321	0.29249	0.73830	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40396	0.10700	0.31384	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11809	0.16977	0.45903	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08499	0.47053	0.64802	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36799	0.07875	0.41218	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28346	0.11526	0.43855	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39071	0.31969	0.08267	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04428	0.41714	0.74155	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48365	0.28252	0.87360	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15592	0.16633	0.12572	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92675	0.62301	0.40152	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.70271	0.51835	0.85629	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58346	0.94812	0.73577	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.70962	0.62779	0.82461	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95522	0.74146	0.16800	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81444	0.84006	0.12850	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.55943	0.89712	0.62477	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.84782	0.87665	0.47390	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.87873	0.59028	0.28929	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59136	0.95698	0.53293	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68650	0.94631	0.48978	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57405	0.72844	0.85528	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.79914	0.85424	0.78477	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92189	0.61960	0.19241	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48006	0.74522	0.07001	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92000	0.84102	0.41032	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90775	0.72473	0.45037	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68466	0.63594	0.09054	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48849	0.90156	0.47159	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71116	0.74988	0.85968	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81439	0.95114	0.64125	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82773	0.53756	0.12942	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81489	0.96343	0.74249	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91733	0.84266	0.20176	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82000	0.97000	0.52456	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86892	0.81898	0.30916	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.85278	0.49836	0.46307	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48581	0.84447	0.80650	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72112	0.75916	0.06613	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61898	0.77555	0.07700	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71931	0.98485	0.77205	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.80858	0.43282	0.62225	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47333	0.14521	0.46969	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63062	0.08267	0.54584	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81664	0.39905	0.52579	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70056	0.30555	0.49377	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.57822	0.42436	0.84891	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.50926	0.19264	0.80917	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.71613	0.52868	0.06731	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91933	0.11522	0.50575	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81162	0.40646	0.73656	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90070	0.35521	0.52185	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58529	0.18221	0.73988	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56126	0.06128	0.74375	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58826	0.18312	0.53814	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92676	0.06138	0.77596	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77803	0.49420	0.79632	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48923	0.29621	0.07923	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59740	0.40512	0.10163	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71077	0.26416	0.75955	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94159	0.42529	0.77053	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55517	0.20817	0.64643	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.44866	0.76260	0.95932	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.74423	0.52830	0.95325	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76385	0.78463	0.96890	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38182	0.86013	0.19396	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40140	0.97494	0.16283	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.36838	0.85991	0.40729	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47067	0.74395	0.86157	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36908	0.63844	0.82264	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25864	0.76971	0.17478	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03389	0.97467	0.18171	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17778	0.54025	0.12253	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.12603	0.52342	0.46246	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02318	0.60268	0.17829	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.40652	0.86318	0.29482	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.17905	0.59406	0.30644	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31569	0.95081	0.42732	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15957	0.62505	0.40154	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27081	0.72210	0.43873	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38537	0.60537	0.10330	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26189	0.50903	0.86148	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05262	0.93783	0.40785	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46450	0.83603	0.14297	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07122	0.66188	0.39931	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15850	0.62761	0.19629	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.21127	0.26543	0.95574	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.49639	0.25302	0.98572	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.24709	0.51140	0.97710	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.91175	0.72570	0.58798	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.59445	0.49288	0.59789	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.60826	0.44208	0.64593	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.67123	0.54084	0.55973	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.57879	0.55159	0.63505	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.61943	0.79533	0.30869	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.59534	0.60429	0.33945	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.64888	0.61759	0.28269	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.55677	0.50708	0.38711	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.58139	0.41847	0.35488	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.48988	0.49072	0.46658	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.49274	0.41480	0.53884	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.44789	0.56655	0.48067	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.39356	0.57426	0.56627	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.49130	0.66532	0.42616	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.46364	0.72354	0.44198	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.56751	0.68820	0.35998	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.61262	0.77887	0.23776	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.70847	0.84319	0.32367	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.58145	0.84558	0.32416	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.50395	0.33837	0.34715	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.63508	0.40448	0.39963	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.62246	0.44165	0.29040	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.51268	0.35722	0.50520	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.45839	0.62180	0.61554	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.33498	0.49367	0.59477	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.34945	0.61989	0.55378	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.34015	0.44607	0.41283	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.35914	0.47366	0.34449	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.32244	0.36072	0.42203	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.27217	0.45398	0.44095	Biso	1.000	H
C13	1.0000	0.38967	0.34169	0.59692	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.91390	0.71029	0.65097	Biso	1.000	O
H20	1.0000	0.40357	0.27899	0.62934	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.37742	0.38889	0.64935	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.31292	0.29643	0.55858	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.88781	0.75529	0.68070	Biso	1.000	H

TS9-10/C3 in TMB-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04811	0.18238	0.52153	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08495	0.30710	0.51071	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28533	0.39830	0.83112	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14573	0.49323	0.79276	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25788	0.27949	0.06350	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17854	0.12594	0.27888	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05757	0.17888	0.72434	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15475	0.07344	0.18466	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15096	0.07164	0.38936	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08946	0.16325	0.61293	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26508	0.27920	0.84945	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.37094	0.27594	0.82096	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24643	0.04384	0.15915	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48476	0.20350	0.14186	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04657	0.40930	0.52472	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16588	0.19202	0.79365	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26091	0.50879	0.06788	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38296	0.07757	0.19113	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23654	0.39042	0.09173	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.03589	0.29416	0.73317	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40229	0.09891	0.30659	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.10092	0.14937	0.44658	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07638	0.46047	0.63533	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.36845	0.06892	0.40501	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28290	0.10295	0.43438	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39613	0.31920	0.09622	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.05036	0.41285	0.73107	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.48988	0.28120	0.86864	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.15666	0.15948	0.11788	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.93577	0.62403	0.40292	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.72315	0.51795	0.85972	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.58967	0.94295	0.72754	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.72439	0.62356	0.82341	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95448	0.73454	0.15516	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81711	0.83553	0.12503	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56141	0.89747	0.61558	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86532	0.88732	0.46281	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91551	0.60295	0.28728	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59862	0.95869	0.52453	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69364	0.94439	0.48558	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58330	0.71994	0.84485	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81234	0.85363	0.78575	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92975	0.61711	0.18552	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48353	0.73698	0.06188	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.92871	0.84051	0.40040	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91433	0.72672	0.45055	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68982	0.62944	0.08604	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49917	0.90780	0.46012	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.72100	0.74466	0.85664	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81737	0.92654	0.63474	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82072	0.52582	0.14120	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82282	0.95567	0.73427	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.92108	0.83659	0.19509	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.82541	0.96696	0.52104	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.87155	0.80605	0.30239	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84026	0.49780	0.45654	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49316	0.83304	0.79371	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72437	0.75251	0.06331	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62114	0.76629	0.07490	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72736	0.97906	0.75934	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82338	0.44030	0.61736	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47502	0.13555	0.46153	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.64108	0.08515	0.53796	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81723	0.40105	0.51937	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.69726	0.30671	0.49795	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59985	0.42141	0.86208	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51868	0.19042	0.80843	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72362	0.52365	0.06499	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91846	0.11394	0.51747	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81850	0.40026	0.73003	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90202	0.35946	0.50451	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58592	0.17346	0.73482	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56684	0.05475	0.74566	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58712	0.17712	0.53356	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93530	0.05837	0.75973	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79322	0.49034	0.79588	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48732	0.28838	0.07416	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60265	0.39412	0.07895	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71257	0.25913	0.74389	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94206	0.40650	0.76542	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54357	0.18797	0.64261	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.46576	0.76510	0.95027	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77438	0.53849	0.95411	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76800	0.77992	0.96634	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38390	0.85409	0.18486	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40908	0.97133	0.15492	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37480	0.85320	0.39887	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48090	0.73726	0.85356	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37732	0.62935	0.82145	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25949	0.76830	0.16436	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03949	0.96852	0.17841	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18743	0.53523	0.12814	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.13687	0.51416	0.45154	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02613	0.59901	0.15409	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.40749	0.85418	0.28549	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16278	0.60239	0.30226	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.31798	0.94108	0.41845	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16245	0.62264	0.40316	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27881	0.71684	0.43402	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38724	0.59370	0.08302	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25800	0.50715	0.85643	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06216	0.92971	0.39158	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46263	0.82484	0.13370	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07422	0.65591	0.42765	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15911	0.62700	0.18789	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23943	0.24975	0.94868	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46620	0.23573	0.97984	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.22907	0.51317	0.96958	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.90723	0.72975	0.55956	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.56400	0.45714	0.64833	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.49000	0.38336	0.62272	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.61619	0.42556	0.67559	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.54045	0.49488	0.70139	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.62059	0.78569	0.31104	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.56051	0.58201	0.33085	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.60828	0.58786	0.27177	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.50058	0.47915	0.37378	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.50362	0.37970	0.33601	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.43619	0.46941	0.45025	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.62650	0.53622	0.57598	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.43541	0.56484	0.48243	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.37452	0.56293	0.56657	Biso	1.000	C
C10	1.0000	0.49632	0.66585	0.43711	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.49469	0.73775	0.46274	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.55829	0.67678	0.36056	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.62865	0.77080	0.24136	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.70507	0.83645	0.33682	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.57900	0.83464	0.31558	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.42066	0.31504	0.31405	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.53252	0.34093	0.38462	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.55976	0.40405	0.27905	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.64833	0.50311	0.51869	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.41566	0.55413	0.62584	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.28880	0.49364	0.56776	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.37192	0.64011	0.57401	Biso	1.000	H
C12	1.0000	0.36263	0.35616	0.49068	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.40408	0.30685	0.49585	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.33155	0.36033	0.55618	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.28989	0.30894	0.44828	Biso	1.000	H
C13	1.0000	0.67169	0.65026	0.58140	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.88184	0.71570	0.62388	Biso	1.000	O
H20	1.0000	0.77188	0.67240	0.60928	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.64220	0.68380	0.63349	Biso	1.000	H
H22	1.0000	0.69991	0.69868	0.52050	Biso	1.000	H
H23	1.0000	0.90713	0.78843	0.65128	Biso	1.000	H

TS1-2 in PX-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05598	0.18000	0.53087	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09074	0.30429	0.52012	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29391	0.40027	0.82939	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14824	0.49100	0.79709	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.27048	0.28242	0.07302	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16986	0.12120	0.28469	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04913	0.17730	0.73697	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15786	0.06886	0.19134	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15555	0.07057	0.39615	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08386	0.15994	0.62721	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26481	0.27971	0.85557	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35932	0.25981	0.82184	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24988	0.03615	0.17748	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48826	0.19240	0.13707	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05478	0.40822	0.53009	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15449	0.19323	0.81108	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25688	0.49819	0.07267	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.39065	0.07595	0.19829	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.25242	0.39269	0.11188	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02423	0.29125	0.74216	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.42624	0.11552	0.31059	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12522	0.15541	0.46486	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07595	0.45786	0.64096	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.38115	0.07465	0.40579	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29183	0.10449	0.43164	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40959	0.31952	0.10157	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04855	0.41368	0.73763	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48526	0.27678	0.86598	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.17128	0.15619	0.12080	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92970	0.61123	0.40005	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71395	0.50846	0.85296	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58437	0.93531	0.73162	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.72594	0.62271	0.83024	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96114	0.73086	0.16707	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82125	0.82246	0.12282	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56287	0.88364	0.62103	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86316	0.87185	0.47476	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.88426	0.57983	0.28770	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59834	0.94331	0.52919	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69576	0.93376	0.48933	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57348	0.70567	0.83053	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80708	0.84861	0.78931	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92962	0.60977	0.19147	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.49180	0.73497	0.06740	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.93007	0.83551	0.40588	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91619	0.71813	0.44698	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.70089	0.61930	0.07273	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49894	0.88635	0.46520	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71203	0.73881	0.85753	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81771	0.93150	0.64139	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.83897	0.52521	0.12740	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81844	0.95334	0.74183	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92465	0.83369	0.19912	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82954	0.96111	0.52529	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87467	0.81265	0.30650	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84010	0.49138	0.46278	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48571	0.82644	0.79822	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72106	0.74014	0.06680	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61456	0.73777	0.10189	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72072	0.97315	0.76757	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81883	0.41385	0.61641	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47912	0.13584	0.47108	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63583	0.06870	0.54265	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82154	0.38919	0.51636	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70757	0.29034	0.48713	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58700	0.42056	0.85673	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52035	0.18967	0.80696	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.73334	0.51244	0.05617	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92832	0.10654	0.51336	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81491	0.39074	0.73160	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.91438	0.35947	0.49804	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59187	0.17137	0.73812	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56089	0.04804	0.74333	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59607	0.17145	0.53560	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92827	0.05590	0.77220	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77109	0.47884	0.77858	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49537	0.28334	0.07394	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.61387	0.38447	0.08084	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71862	0.24832	0.75774	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94579	0.41905	0.77199	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.56526	0.19940	0.64416	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.50637	0.78179	0.95620	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77075	0.51326	0.94308	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74310	0.78035	0.96882	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.39067	0.84763	0.19111	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.41209	0.96520	0.16790	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37962	0.84930	0.40174	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48407	0.73657	0.85986	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36817	0.63225	0.85129	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26731	0.76047	0.16853	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04271	0.96530	0.17724	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18080	0.52550	0.12853	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14909	0.51632	0.46137	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03279	0.59595	0.18012	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41489	0.83998	0.29066	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.19133	0.59498	0.30738	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.33222	0.94614	0.41197	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16914	0.61704	0.40421	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27440	0.72010	0.44205	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.37995	0.59546	0.07431	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25468	0.49832	0.86471	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06303	0.92943	0.40125	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.47204	0.82597	0.13601	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06930	0.63771	0.40767	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16763	0.62073	0.19687	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.25253	0.26546	0.95709	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46960	0.23535	0.97814	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21110	0.47443	0.97630	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.86938	0.70268	0.56196	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.65555	0.59199	0.58601	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.83521	0.68729	0.62205	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.64291	0.65177	0.62273	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.65519	0.52433	0.62195	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.68547	0.60978	0.51870	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.84822	0.75962	0.64269	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.54139	0.37153	0.38014	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.49435	0.41707	0.50203	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.48449	0.34441	0.53784	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.47704	0.49701	0.54849	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.41951	0.46776	0.63783	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.48265	0.58707	0.49790	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.46487	0.64654	0.53078	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.51307	0.60095	0.40939	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.52077	0.67245	0.37310	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.53610	0.52425	0.36572	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.57292	0.54252	0.27069	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.52497	0.43162	0.41329	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.43722	0.54219	0.67584	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.44358	0.41725	0.67772	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.32895	0.41867	0.62766	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.60860	0.49063	0.25216	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.63483	0.63016	0.25947	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.50222	0.52180	0.22640	Biso	1.000	H

TS2-3 in PX-based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04690	0.17251	0.52175	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.06791	0.28550	0.48382	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29147	0.39535	0.83333	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14741	0.48448	0.78778	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26068	0.27192	0.06376	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16889	0.10906	0.28320	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05523	0.17717	0.72526	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15155	0.06286	0.18704	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14177	0.04754	0.39157	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.10378	0.19213	0.61449	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26418	0.27315	0.84977	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36489	0.26230	0.81820	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24230	0.03086	0.16387	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48098	0.18498	0.13180	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04529	0.39409	0.51931	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16128	0.18920	0.79614	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25876	0.49852	0.06453	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38104	0.06961	0.19305	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24340	0.38509	0.09452	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01632	0.27815	0.75252	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40449	0.10899	0.30605	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.09697	0.12304	0.45806	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07680	0.42705	0.63280	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37531	0.07065	0.40396	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.27261	0.07636	0.43583	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39969	0.30867	0.09191	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04655	0.40050	0.73212	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.49116	0.28103	0.86165	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.16191	0.15492	0.12266	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.92370	0.60543	0.39706	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.71734	0.50981	0.85611	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.59670	0.94473	0.73370	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.73476	0.62211	0.82006	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95525	0.72705	0.15355	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81980	0.82342	0.11251	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56875	0.91801	0.61967	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86092	0.87345	0.46094	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91448	0.59023	0.28089	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59155	0.93925	0.51893	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69194	0.92763	0.49058	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57638	0.70117	0.82037	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81554	0.85051	0.79763	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93171	0.60894	0.17979	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.48798	0.73050	0.05972	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.91602	0.82214	0.39453	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.89023	0.70187	0.44086	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68786	0.61365	0.08835	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48766	0.85008	0.46876	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.71227	0.73153	0.85298	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.80483	0.89210	0.63730	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82577	0.51704	0.13289	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82387	0.94128	0.73336	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.91786	0.82740	0.19043	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.82226	0.94837	0.52599	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.86013	0.79716	0.29569	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.82647	0.47486	0.44365	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49471	0.82625	0.78985	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71222	0.73411	0.06798	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61288	0.74538	0.10266	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73495	0.97481	0.75615	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.83287	0.44867	0.60985	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47475	0.15347	0.46179	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.61550	0.05826	0.49445	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81620	0.39268	0.51673	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.69727	0.29193	0.51019	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58936	0.42643	0.86159	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.53962	0.21063	0.79547	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72305	0.51045	0.06131	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91841	0.09433	0.53311	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81925	0.39807	0.72038	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90289	0.35376	0.50271	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59555	0.16657	0.73191	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.58289	0.05778	0.77141	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58181	0.16002	0.52773	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.94116	0.04325	0.74305	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77379	0.46745	0.79122	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48894	0.27564	0.06787	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60551	0.37883	0.07824	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.72195	0.25246	0.72077	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94703	0.41590	0.75821	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.53721	0.14300	0.63987	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.50474	0.77248	0.94713	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77043	0.52549	0.94952	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.72507	0.75481	0.96678	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38623	0.84279	0.18956	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40917	0.96158	0.16933	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38306	0.84052	0.39675	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48665	0.73178	0.84944	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37018	0.62943	0.83593	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25921	0.75959	0.17877	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03531	0.96075	0.17427	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19481	0.53098	0.13025	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14069	0.51040	0.45756	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03052	0.59487	0.14814	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.42408	0.83638	0.28564	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.14588	0.57802	0.30294	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.35385	0.94955	0.41433	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15278	0.60997	0.40237	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.26780	0.71115	0.42446	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38551	0.58673	0.06549	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25450	0.49806	0.85788	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05157	0.90501	0.38659	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.45424	0.81545	0.12350	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06103	0.63794	0.42781	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15773	0.61628	0.19005	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23951	0.24317	0.94919	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47065	0.22956	0.97148	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21062	0.48887	0.96961	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.83380	0.68301	0.53734	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.70470	0.61385	0.60657	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.80464	0.67782	0.60078	Biso	1.000	O
H3	1.0000	0.81580	0.75213	0.61485	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.33248	0.41860	0.33060	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.32362	0.35257	0.28571	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.27769	0.38005	0.38767	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.30532	0.47030	0.29574	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.53145	0.54602	0.27696	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.49345	0.41763	0.40378	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.48785	0.34918	0.36419	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.53236	0.43244	0.48773	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.55802	0.37670	0.51584	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.54073	0.52191	0.54288	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.58799	0.54043	0.62750	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.50590	0.59581	0.50482	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.51116	0.66308	0.54559	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.46723	0.58167	0.42075	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.44206	0.63852	0.39351	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.45681	0.49115	0.36026	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.52278	0.48129	0.23069	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.61933	0.59768	0.29541	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.50508	0.59884	0.24313	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.57422	0.59350	0.67292	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.59524	0.47331	0.65855	Biso	1.000	H

TS3-4 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04811	0.16974	0.52213	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.08274	0.29383	0.51134	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28097	0.39059	0.85092	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14216	0.48376	0.79671	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25425	0.26492	0.06345	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17768	0.10944	0.28510	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05286	0.17245	0.72680	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15631	0.06197	0.18949	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14997	0.05513	0.39560	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08093	0.14996	0.61663	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26151	0.27010	0.85481	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36871	0.27237	0.82216	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24959	0.03497	0.16264	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48538	0.19016	0.13586	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05181	0.40090	0.52636	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16495	0.19147	0.79343	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25610	0.49888	0.07058	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38672	0.07198	0.19574	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23275	0.37834	0.08059	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.02952	0.28682	0.73362	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.41111	0.11145	0.30921	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11267	0.14293	0.45304	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08510	0.45639	0.63576	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37220	0.05961	0.40307	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28155	0.08267	0.43956	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39245	0.30426	0.09619	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.05005	0.40779	0.73083	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.49034	0.27823	0.86416	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15782	0.15117	0.12628	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93152	0.60642	0.40257	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.72386	0.50825	0.85836	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58585	0.93236	0.73283	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.73606	0.62438	0.84285	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95280	0.72437	0.16030	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82178	0.82793	0.12131	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.55388	0.87656	0.62313	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85569	0.86358	0.47027	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91804	0.58671	0.28650	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59166	0.93472	0.53080	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68691	0.92020	0.49265	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58083	0.70526	0.82445	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81444	0.84848	0.79184	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93145	0.60688	0.18537	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48631	0.72239	0.06940	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92045	0.82427	0.40226	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90229	0.70555	0.44468	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.70436	0.62434	0.07151	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49322	0.88163	0.46560	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71716	0.73990	0.85989	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82148	0.92039	0.63959	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82406	0.51541	0.13940	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82274	0.94874	0.73910	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92000	0.82771	0.19701	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82321	0.95173	0.52386	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86594	0.80117	0.30295	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83348	0.47866	0.45253	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49264	0.82839	0.80597	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71988	0.74340	0.06807	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61350	0.73781	0.10706	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72427	0.96848	0.76144	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.80916	0.41894	0.61301	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47336	0.11501	0.46601	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63398	0.06135	0.54327	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81459	0.38362	0.51568	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70132	0.28184	0.48917	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59819	0.41865	0.84812	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51155	0.18121	0.80479	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72614	0.50964	0.06286	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.91927	0.09722	0.50929	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81437	0.39282	0.72748	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90818	0.35306	0.50666	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58694	0.16744	0.73665	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.56715	0.04805	0.74586	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58944	0.16049	0.53404	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93215	0.05398	0.76653	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79359	0.49108	0.78671	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48882	0.28097	0.07420	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59988	0.38958	0.08951	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71181	0.25351	0.75517	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94245	0.40681	0.75939	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55518	0.18709	0.64174	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.48667	0.74454	0.95426	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76669	0.50131	0.95199	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.73614	0.78466	0.97041	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38840	0.84080	0.18777	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.41107	0.96078	0.17396	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37781	0.83725	0.39579	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48373	0.72513	0.85327	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37331	0.62206	0.82409	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26441	0.75595	0.16475	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04224	0.95641	0.17987	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18156	0.51569	0.13743	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14153	0.50225	0.45053	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03032	0.59475	0.15086	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41437	0.82365	0.28530	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.15989	0.59490	0.30434	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.32627	0.93137	0.39787	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16023	0.61073	0.40586	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27560	0.70641	0.43666	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38134	0.58212	0.09134	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25392	0.50180	0.86295	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05461	0.91430	0.39842	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46673	0.82314	0.12521	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06853	0.63763	0.43405	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15918	0.61675	0.18952	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23343	0.22432	0.95070	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47877	0.24053	0.97677	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.22713	0.51871	0.97500	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.86387	0.69576	0.55119	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.67622	0.59772	0.61974	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.84234	0.69142	0.61555	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.68110	0.60012	0.69080	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.67845	0.53117	0.58425	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.66274	0.65729	0.58370	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.85679	0.76644	0.62946	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.34935	0.42844	0.30395	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.35458	0.36949	0.25877	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.27325	0.38393	0.34365	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.34463	0.49233	0.26468	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.56155	0.54599	0.30567	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.46010	0.39428	0.41635	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.46146	0.32850	0.37769	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.46345	0.39241	0.50567	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.46682	0.32522	0.54041	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.46457	0.48082	0.55869	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.48782	0.48941	0.64841	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.45013	0.56505	0.51250	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.44429	0.62786	0.55195	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.44702	0.56726	0.42324	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.43860	0.63235	0.38975	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.45466	0.48392	0.36436	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.56690	0.48712	0.26014	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.63688	0.58534	0.34669	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.55879	0.61109	0.26644	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.48074	0.55032	0.68902	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.49104	0.42235	0.68295	Biso	1.000	H

TS4-5 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05918	0.18358	0.51539	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09103	0.30597	0.49750	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28946	0.40135	0.83721	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.15021	0.49283	0.78671	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26637	0.27997	0.05953	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17699	0.11045	0.27717	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.06446	0.17985	0.71865	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.16561	0.07204	0.17950	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15439	0.06169	0.38882	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.10428	0.17391	0.60793	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26973	0.28129	0.84899	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.37764	0.28210	0.82100	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.26443	0.05312	0.15394	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.50168	0.20747	0.13411	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05436	0.40827	0.51817	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.17330	0.19758	0.78927	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26777	0.51149	0.06158	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.39963	0.08690	0.18976	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24929	0.39484	0.08412	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.03750	0.29139	0.73161	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.42136	0.12650	0.30310	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11317	0.14842	0.44308	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08352	0.45581	0.62937	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37940	0.07408	0.39633	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28925	0.09890	0.43106	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40508	0.31655	0.08896	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.05462	0.41099	0.72570	Biso	1.000	P
Al6	1.0000	0.49599	0.27986	0.86169	Biso	1.000	Al
O17	1.0000	0.16810	0.16525	0.12078	Biso	1.000	O
Al7	1.0000	0.93781	0.62114	0.39795	Biso	1.000	Al
P7	1.0000	0.73425	0.51657	0.85382	Biso	1.000	P
Al8	1.0000	0.59638	0.94308	0.72013	Biso	1.000	Al
O18	1.0000	0.73071	0.62359	0.83054	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96240	0.73000	0.14910	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.83155	0.83598	0.11156	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56729	0.89290	0.60915	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86160	0.88187	0.45170	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.92148	0.59930	0.28195	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.60370	0.95554	0.51868	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69921	0.94373	0.47756	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.58301	0.71105	0.82073	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81685	0.85115	0.77953	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93654	0.61266	0.18035	Biso	1.000	P
Al9	1.0000	0.49762	0.74099	0.05589	Biso	1.000	Al
Si1	1.0000	0.92812	0.83547	0.39340	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.89878	0.71423	0.43995	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.70698	0.63201	0.06582	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.50436	0.90435	0.45442	Biso	1.000	O
Al10	1.0000	0.72076	0.74359	0.84935	Biso	1.000	Al
O30	1.0000	0.81790	0.91523	0.62564	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82723	0.52157	0.13595	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82823	0.95107	0.72471	Biso	1.000	P
Al11	1.0000	0.93318	0.83674	0.18401	Biso	1.000	Al
Al12	1.0000	0.83060	0.96525	0.51328	Biso	1.000	Al
O32	1.0000	0.88378	0.81327	0.29116	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84687	0.49342	0.44998	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49807	0.83364	0.78624	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72922	0.75344	0.05767	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62489	0.75554	0.09309	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73519	0.97871	0.74866	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82124	0.42880	0.60910	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47875	0.12816	0.46081	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.64556	0.08122	0.53498	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82214	0.39494	0.51073	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70497	0.29958	0.48392	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.61285	0.41639	0.85630	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51305	0.18274	0.79874	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.73701	0.52239	0.05422	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92936	0.11069	0.51417	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82183	0.39974	0.72330	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90991	0.35685	0.49796	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59136	0.17463	0.73022	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57548	0.05654	0.73670	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59549	0.17604	0.52798	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.94263	0.05365	0.74564	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.80296	0.49969	0.78115	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49791	0.28834	0.06528	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.61085	0.39702	0.06631	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71527	0.26215	0.75002	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94672	0.40746	0.75725	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55894	0.19647	0.63640	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.50718	0.78224	0.94376	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.79084	0.52927	0.94549	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74995	0.79140	0.95919	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.39251	0.85231	0.18265	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.42228	0.97450	0.16740	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38379	0.85168	0.38984	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.49157	0.74049	0.84658	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37678	0.63616	0.83178	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26626	0.77289	0.16229	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.05533	0.96426	0.16167	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.20706	0.54171	0.13227	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.14365	0.51869	0.44877	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03316	0.59394	0.14981	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41914	0.83514	0.27985	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.16999	0.60829	0.30040	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.33160	0.94557	0.39047	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16739	0.62717	0.40136	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.28312	0.72161	0.43321	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39551	0.59692	0.06333	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25792	0.50858	0.85685	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06355	0.91987	0.39706	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46557	0.82670	0.12055	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07805	0.65944	0.42482	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16805	0.63010	0.18548	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23957	0.24292	0.94643	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47430	0.23221	0.97244	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21883	0.51054	0.96850	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.82511	0.68705	0.53170	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.53692	0.48040	0.67502	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.79006	0.68043	0.59276	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.53832	0.50929	0.74219	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.45275	0.41049	0.66253	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.59411	0.44737	0.67187	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.81209	0.75717	0.60998	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.57124	0.53433	0.25494	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.56478	0.58899	0.20617	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.65665	0.57542	0.28073	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.55343	0.45682	0.22220	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.36580	0.45670	0.29403	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.51582	0.61752	0.37583	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.51534	0.68170	0.33423	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.54109	0.63704	0.46269	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.56044	0.71604	0.49247	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.54034	0.55252	0.51969	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.56701	0.57451	0.60957	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.51636	0.44731	0.48008	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.51748	0.38385	0.52162	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.49141	0.42736	0.39311	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.47267	0.34769	0.36429	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.48671	0.50951	0.33152	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.36075	0.51410	0.24710	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.30560	0.43918	0.34742	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.34325	0.37862	0.25975	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.68733	0.62926	0.59316	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.56630	0.64787	0.63563	Biso	1.000	H

TS5-6 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.06484	0.19333	0.52722	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.10406	0.31928	0.52190	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.31234	0.41620	0.87162	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.14049	0.46221	0.80843	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25560	0.28242	0.06423	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.18616	0.12813	0.29110	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.05206	0.18624	0.73111	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15580	0.08326	0.19506	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15922	0.07405	0.40140	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08504	0.16297	0.62262	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26567	0.28766	0.86457	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36216	0.26694	0.83944	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24150	0.04912	0.16118	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47945	0.20931	0.14698	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.07250	0.42649	0.53577	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.17623	0.23713	0.79153	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26152	0.51873	0.07259	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37747	0.08061	0.19308	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24076	0.39937	0.08255	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00453	0.28447	0.72717	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39762	0.09795	0.30849	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.13494	0.16978	0.46125	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09508	0.47238	0.64816	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.38515	0.08234	0.41015	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28831	0.09603	0.44522	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39850	0.32272	0.07888	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04789	0.41175	0.73796	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.49187	0.28130	0.87017	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.16327	0.17878	0.13655	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93648	0.62366	0.40724	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.72176	0.51914	0.86101	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59721	0.95060	0.73187	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.72471	0.62988	0.83889	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96502	0.75101	0.16744	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82186	0.83789	0.12422	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.57670	0.89616	0.62220	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86108	0.88188	0.47745	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91958	0.60742	0.29087	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59724	0.94666	0.52686	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.70756	0.96280	0.48879	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57894	0.71792	0.83091	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.81084	0.85425	0.78303	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93700	0.63049	0.19016	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48712	0.74267	0.06700	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92516	0.84262	0.40817	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90964	0.72448	0.45062	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69617	0.63676	0.06980	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.50124	0.86429	0.46603	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71752	0.75172	0.85843	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.83197	0.95531	0.64083	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82871	0.54367	0.14208	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82944	0.96587	0.74242	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92238	0.84796	0.20265	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.83730	0.98062	0.52410	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86919	0.81910	0.30919	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84029	0.49341	0.45597	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49720	0.84445	0.80027	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72322	0.76009	0.06511	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61880	0.76409	0.09687	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73358	0.98793	0.77024	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82639	0.43752	0.61643	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.49444	0.17463	0.45356	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.60188	0.06035	0.53060	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.83213	0.40214	0.51925	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.72498	0.29246	0.49541	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59780	0.42348	0.85951	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51500	0.19312	0.80051	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72792	0.52773	0.06399	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.93794	0.12401	0.50507	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82168	0.40896	0.73135	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.93218	0.38209	0.50740	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59310	0.18357	0.73244	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57424	0.06414	0.73747	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59492	0.18325	0.52912	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.94236	0.06182	0.77736	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79047	0.50064	0.78926	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49285	0.29274	0.07324	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60595	0.40019	0.08677	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71756	0.26833	0.75366	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.95068	0.42823	0.76957	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.56302	0.20765	0.63843	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.47941	0.76408	0.95230	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.77365	0.52548	0.95372	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.75146	0.80260	0.96756	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.39096	0.86261	0.19024	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.39581	0.97010	0.15539	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.39628	0.86206	0.39824	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.48242	0.74163	0.85215	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37149	0.63891	0.82154	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26790	0.76555	0.19036	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03684	0.98385	0.18740	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18363	0.53237	0.13781	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.16602	0.53694	0.46782	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03403	0.61448	0.15654	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43988	0.88182	0.28577	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13973	0.57839	0.30979	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.36504	0.96465	0.43532	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16396	0.62506	0.40592	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.28019	0.72986	0.41117	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38619	0.60315	0.09455	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26427	0.51402	0.86837	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05878	0.93472	0.40300	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46383	0.83693	0.12812	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07418	0.65384	0.43641	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15753	0.62510	0.19853	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.21326	0.23138	0.95454	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.48867	0.23904	0.98148	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23429	0.53965	0.97694	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.87230	0.71458	0.55822	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.46746	0.44972	0.68912	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.48332	0.48256	0.75629	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.38079	0.38114	0.68566	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.52011	0.41283	0.67660	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.58367	0.54933	0.27826	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.48268	0.42003	0.40303	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.48511	0.34951	0.37356	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.47973	0.42840	0.49186	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.47842	0.36391	0.53366	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.47994	0.52367	0.53270	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.48608	0.53892	0.62364	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.47767	0.60627	0.47474	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.47480	0.67579	0.50526	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.47750	0.59661	0.38597	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.47508	0.65925	0.34368	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.47968	0.50176	0.33969	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.58820	0.48105	0.24579	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.66032	0.59907	0.31631	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.57793	0.60244	0.22743	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.47992	0.60946	0.64877	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.37121	0.43722	0.28377	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.37211	0.36878	0.24845	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.29706	0.40248	0.32612	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.36671	0.49334	0.23539	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.68113	0.63351	0.60968	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.84565	0.70538	0.62150	Biso	1.000	O
H16	1.0000	0.67337	0.64113	0.67984	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.67720	0.55887	0.58399	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.68401	0.69516	0.56423	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.86825	0.78086	0.64150	Biso	1.000	H

TS-MS1/C2 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05884	0.17614	0.52369	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09890	0.30218	0.51332	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.31053	0.40704	0.86615	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13907	0.45303	0.80239	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25248	0.26709	0.06362	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17916	0.11265	0.28662	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04786	0.17382	0.72826	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15367	0.06591	0.19059	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14926	0.05320	0.39608	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08388	0.15296	0.61993	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26644	0.27916	0.85884	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36237	0.26217	0.82435	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24508	0.03806	0.15971	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48332	0.19482	0.13940	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.06398	0.40693	0.52945	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16878	0.22456	0.79311	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26060	0.50333	0.07165	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38131	0.07111	0.19206	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.23482	0.38235	0.08534	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00120	0.27280	0.72404	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40064	0.09611	0.30706	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12712	0.14929	0.45796	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09441	0.45717	0.64067	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.38061	0.07035	0.40749	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.27886	0.07677	0.44049	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39216	0.30802	0.09425	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04625	0.40072	0.73191	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48767	0.27191	0.86388	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15558	0.15708	0.12938	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92591	0.60500	0.40300	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.72035	0.50815	0.85528	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59465	0.93825	0.73203	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.72086	0.61767	0.83576	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95568	0.72935	0.16008	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82328	0.82978	0.11676	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56971	0.88189	0.62287	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.85295	0.86819	0.46692	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91630	0.58964	0.28563	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.58920	0.92997	0.52701	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.70154	0.95150	0.48958	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57443	0.70900	0.82828	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80983	0.84195	0.78218	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93010	0.61011	0.18472	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48551	0.72708	0.06593	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.91485	0.82294	0.40133	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.89639	0.70434	0.44246	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69712	0.62544	0.07102	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49459	0.84417	0.46615	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71184	0.73799	0.85333	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82703	0.93973	0.63830	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82126	0.52129	0.13834	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82630	0.95138	0.73962	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91826	0.82997	0.19652	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82968	0.96200	0.52180	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.85999	0.80002	0.30115	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83180	0.47107	0.44748	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49284	0.83632	0.80246	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72143	0.74769	0.06225	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61755	0.75075	0.09775	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73035	0.97286	0.76889	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82199	0.42283	0.61043	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48469	0.16118	0.45745	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.58676	0.04036	0.52817	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82435	0.38341	0.51437	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.71655	0.27264	0.49346	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59765	0.41045	0.85039	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51325	0.17887	0.80282	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72471	0.51419	0.05939	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.93184	0.10637	0.50447	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82003	0.40071	0.72592	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.92345	0.36125	0.50355	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59212	0.17306	0.73311	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57825	0.05570	0.73725	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58663	0.16655	0.53026	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93908	0.04898	0.77341	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79417	0.49463	0.78561	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48707	0.28168	0.07283	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59971	0.39005	0.08355	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71574	0.26143	0.75273	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.95050	0.42030	0.76134	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55817	0.19426	0.63952	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.47692	0.75244	0.95279	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76866	0.51160	0.94934	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.74272	0.78511	0.96383	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38533	0.84556	0.18903	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40474	0.96145	0.16177	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38901	0.84380	0.39988	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47859	0.73218	0.85196	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36635	0.63054	0.82212	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25913	0.75838	0.17888	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03840	0.96183	0.18256	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19002	0.52508	0.13902	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.15504	0.51455	0.45790	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02716	0.59423	0.15001	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.42393	0.84740	0.28628	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.14651	0.57934	0.30531	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.36280	0.95233	0.42738	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15700	0.61148	0.40485	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27113	0.71542	0.42405	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38742	0.58426	0.08961	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26029	0.50306	0.86567	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.04961	0.91399	0.39495	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.45662	0.81686	0.12781	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06300	0.63367	0.43430	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15472	0.61625	0.19234	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22613	0.22417	0.95136	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47253	0.23394	0.97743	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.22931	0.52111	0.97652	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.81032	0.66921	0.55735	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.49599	0.50230	0.67951	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.77066	0.64562	0.61395	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.47843	0.49271	0.75027	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.55194	0.47019	0.66392	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.54067	0.59118	0.66321	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.81091	0.71078	0.65165	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.33860	0.43425	0.31489	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.35995	0.40437	0.25548	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.29022	0.36920	0.36276	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.30081	0.48405	0.29662	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.56787	0.54640	0.26991	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.50007	0.41544	0.40285	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.53760	0.36990	0.37414	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.46084	0.39550	0.48816	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.46602	0.33230	0.52725	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.41491	0.45740	0.52874	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.38679	0.44094	0.62565	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.40677	0.53717	0.47957	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.37348	0.58633	0.50833	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.44454	0.55785	0.39024	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.45203	0.63050	0.35620	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.49506	0.49981	0.35047	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.57125	0.48090	0.23213	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.65248	0.60639	0.29271	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.54025	0.59107	0.22667	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.33156	0.47385	0.64210	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.34283	0.35153	0.64136	Biso	1.000	H

TS-MS2/C2 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05343	0.18899	0.52470	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09492	0.31507	0.51038	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.30386	0.40997	0.83213	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13568	0.47475	0.80847	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25906	0.29013	0.06877	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.18056	0.13181	0.28592	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04910	0.17962	0.73085	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15348	0.08368	0.19009	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15108	0.07035	0.39473	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08670	0.17088	0.61958	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26328	0.28607	0.85667	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35881	0.26159	0.83936	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24263	0.05265	0.15968	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48329	0.21010	0.15017	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.06136	0.42014	0.53249	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16356	0.20669	0.79807	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.27109	0.51902	0.07478	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37704	0.08163	0.19323	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.25089	0.40548	0.10993	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01063	0.28446	0.73735	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39012	0.09171	0.30918	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11381	0.15642	0.45561	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09077	0.46219	0.64514	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37577	0.07963	0.41088	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28130	0.09967	0.44245	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39808	0.32194	0.08836	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04496	0.41013	0.73820	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48694	0.27394	0.87167	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15823	0.17487	0.12766	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93060	0.62188	0.40273	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71380	0.51758	0.85712	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59405	0.94807	0.72984	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.70227	0.61711	0.82434	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96109	0.74850	0.16334	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81955	0.84056	0.12080	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.57366	0.89718	0.61954	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.87059	0.89353	0.46727	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91295	0.60248	0.28610	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59213	0.94320	0.52337	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69786	0.95103	0.48215	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57357	0.72370	0.84798	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80264	0.84644	0.77977	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93294	0.62787	0.18580	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48639	0.74989	0.06260	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92523	0.84178	0.40079	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90536	0.72353	0.44343	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68459	0.63520	0.08462	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49098	0.86070	0.46660	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71008	0.74358	0.85424	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81681	0.94263	0.63626	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82651	0.54182	0.13564	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82105	0.95673	0.73748	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92046	0.84719	0.19751	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82883	0.97383	0.52125	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86457	0.81695	0.30300	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83514	0.49206	0.45235	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49065	0.84303	0.79626	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72348	0.75941	0.06068	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62445	0.78012	0.07450	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72837	0.98190	0.76902	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81980	0.43788	0.61443	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48582	0.16952	0.45448	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.60353	0.06034	0.52344	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82347	0.40132	0.51774	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.71385	0.29384	0.49423	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59528	0.41297	0.85823	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.50719	0.18382	0.80193	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72165	0.53096	0.06383	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92468	0.12169	0.51307	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81566	0.40965	0.72921	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.92136	0.37716	0.50660	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58708	0.17979	0.73235	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57590	0.06377	0.73753	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58810	0.17861	0.52862	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93577	0.05280	0.76840	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79211	0.50216	0.79318	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49168	0.29182	0.07654	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60520	0.39936	0.08545	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.70997	0.26999	0.75185	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94299	0.42138	0.76314	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55265	0.19836	0.63812	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45793	0.77084	0.95223	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76502	0.53989	0.95183	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76332	0.78326	0.96276	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38816	0.86500	0.19250	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.39623	0.97219	0.15365	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38613	0.86134	0.40062	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47361	0.74452	0.85487	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36731	0.63949	0.82126	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26386	0.77052	0.19248	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03624	0.98196	0.18232	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19287	0.54862	0.12557	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.15676	0.53002	0.46355	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03117	0.61262	0.15372	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43380	0.88600	0.28915	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.14219	0.57625	0.30438	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.35036	0.96040	0.43870	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15852	0.62047	0.40147	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27548	0.72428	0.41094	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39568	0.60766	0.09189	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26249	0.50891	0.85958	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06020	0.92878	0.38933	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46153	0.83438	0.13542	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06846	0.64930	0.42873	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15711	0.62830	0.19395	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22580	0.26522	0.95504	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.48019	0.23549	0.98464	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.24338	0.51172	0.97487	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.81986	0.68710	0.55739	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.46578	0.31580	0.55817	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.57928	0.72460	0.29755	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.59977	0.57351	0.37633	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.68089	0.60451	0.34541	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.56344	0.48699	0.44014	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.61835	0.45441	0.45589	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.46429	0.44838	0.48644	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.43498	0.37402	0.56642	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.39523	0.49402	0.46322	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.32327	0.47546	0.50378	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.43141	0.58083	0.39841	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.38649	0.62594	0.39295	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.53800	0.62441	0.35649	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.65046	0.73689	0.25840	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.60613	0.80007	0.33745	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.51272	0.71673	0.25397	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.34410	0.32384	0.57417	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.32630	0.43740	0.34865	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.37973	0.41231	0.31533	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.25660	0.36975	0.38394	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.29435	0.47825	0.30566	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.48820	0.44627	0.64986	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.77337	0.65763	0.61046	Biso	1.000	O
H14	1.0000	0.46859	0.39296	0.70793	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.57877	0.49670	0.64253	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.45611	0.50335	0.66183	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.80241	0.72108	0.65044	Biso	1.000	H

TS-MS3/C2 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05186	0.18894	0.52899	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09164	0.31497	0.51693	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.29279	0.40450	0.82232	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13811	0.48782	0.80637	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26229	0.29057	0.07052	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.16753	0.12877	0.28278	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04735	0.18164	0.73417	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15123	0.07801	0.18802	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.14827	0.07464	0.39367	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08570	0.17013	0.62355	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26202	0.28486	0.85297	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35643	0.26211	0.82484	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24263	0.04597	0.16898	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48257	0.20477	0.14381	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05083	0.41550	0.53401	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15328	0.19729	0.80739	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26182	0.51164	0.07481	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38080	0.08100	0.19491	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24140	0.39844	0.11131	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01859	0.29301	0.74040	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40688	0.10530	0.30955	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11349	0.15936	0.45882	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08167	0.46571	0.64485	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37419	0.08260	0.40867	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28495	0.11377	0.43289	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40055	0.32676	0.10087	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04475	0.41619	0.73986	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48209	0.28007	0.87039	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.16144	0.16630	0.11984	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92797	0.62257	0.39977	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.70750	0.51704	0.85699	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58572	0.94601	0.73139	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.70969	0.62274	0.82121	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95760	0.74091	0.16431	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81366	0.83342	0.12531	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56401	0.89649	0.62035	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86556	0.89105	0.46790	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.88212	0.59287	0.28743	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59339	0.95218	0.52703	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69452	0.94963	0.48675	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57481	0.72419	0.85230	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80167	0.85262	0.78582	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92380	0.61936	0.19025	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48118	0.74299	0.06668	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92769	0.84385	0.40445	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90904	0.72577	0.44642	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68287	0.62788	0.08762	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49308	0.88612	0.46486	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71136	0.74467	0.85706	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81339	0.93871	0.63875	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82876	0.53513	0.12923	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81632	0.95901	0.73927	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91983	0.84234	0.19739	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82615	0.97212	0.52417	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87198	0.82071	0.30506	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84629	0.49722	0.45821	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48849	0.84085	0.80104	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71962	0.75162	0.06394	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61799	0.76838	0.07640	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72217	0.98358	0.76704	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81932	0.43601	0.61821	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47886	0.15950	0.46391	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.62170	0.07548	0.53566	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82027	0.40013	0.52106	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70398	0.30344	0.49428	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58306	0.42347	0.86480	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.52180	0.19798	0.80977	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72122	0.52584	0.06182	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92328	0.11973	0.51717	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81181	0.40177	0.73160	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90750	0.36071	0.51076	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58712	0.17876	0.73581	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.55868	0.05638	0.74168	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58789	0.18231	0.53489	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92890	0.05841	0.76933	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.77125	0.48338	0.79213	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48748	0.29079	0.07618	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60531	0.39304	0.07957	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71502	0.25694	0.74755	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94051	0.42115	0.76950	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55070	0.20196	0.64387	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45389	0.76529	0.95604	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.76426	0.53956	0.94949	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76177	0.77728	0.96673	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38323	0.85840	0.19014	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40168	0.97212	0.15748	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37446	0.86008	0.40430	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47314	0.74225	0.85862	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37000	0.63655	0.82237	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26028	0.76712	0.17175	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03565	0.97507	0.17557	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.17688	0.53789	0.11871	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.13663	0.52345	0.46066	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02467	0.60192	0.17625	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.40903	0.86392	0.29090	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.17875	0.59222	0.30381	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.33094	0.95732	0.43012	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16202	0.62325	0.39976	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27230	0.72366	0.43405	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38407	0.60283	0.09716	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26033	0.50754	0.85778	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06231	0.93276	0.39753	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46583	0.83341	0.14014	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06996	0.65491	0.40193	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15935	0.62556	0.19339	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.24545	0.27523	0.95458	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.46093	0.23640	0.98241	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.24268	0.50375	0.97338	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.84125	0.69517	0.56618	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.50070	0.47468	0.64905	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.80233	0.66627	0.62256	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.48130	0.42500	0.70927	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.59081	0.51754	0.63803	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.47655	0.53810	0.66018	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.82044	0.73271	0.65669	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.35380	0.38793	0.39619	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.35366	0.31312	0.41824	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.26946	0.37461	0.39927	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.39529	0.41964	0.33306	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.60630	0.75438	0.30864	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.61369	0.59713	0.38879	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.69519	0.62720	0.35899	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.57134	0.50776	0.44538	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.61910	0.46735	0.46174	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.46431	0.46824	0.48732	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.43566	0.39823	0.57046	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.40433	0.52431	0.46479	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.33028	0.50561	0.50270	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.45068	0.61734	0.40634	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.40306	0.65797	0.39236	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.55446	0.65515	0.36889	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.62323	0.73011	0.24421	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.68705	0.81789	0.33469	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.55309	0.79069	0.29943	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.34569	0.35650	0.58325	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.45794	0.33318	0.56214	Biso	1.000	H

TS9-10/C2 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.04726	0.16875	0.52103	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.07567	0.29142	0.51789	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28071	0.39004	0.85162	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13856	0.47883	0.79452	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.24910	0.26405	0.06226	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17968	0.11645	0.28222	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04459	0.16943	0.72651	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.14832	0.06267	0.18864	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15260	0.06476	0.39334	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.06860	0.14059	0.61687	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25598	0.26765	0.85407	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.36046	0.26567	0.81976	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23483	0.02785	0.15811	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47273	0.18439	0.13151	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.04917	0.40158	0.52683	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.15855	0.19267	0.79215	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.25622	0.49746	0.06652	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37276	0.06176	0.18585	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.22425	0.37501	0.08183	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01989	0.28306	0.73032	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39584	0.08774	0.30057	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12670	0.15689	0.45668	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.07405	0.45528	0.63653	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37047	0.05799	0.39999	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28169	0.08421	0.43527	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.38911	0.30675	0.09208	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04249	0.40482	0.73112	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48563	0.27861	0.86046	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15023	0.14997	0.12330	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93496	0.60863	0.40126	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71566	0.50729	0.85468	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.58338	0.93310	0.73161	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.73293	0.62438	0.83420	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95694	0.72959	0.16041	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81662	0.82059	0.12133	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56416	0.88160	0.62137	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.84850	0.85337	0.47545	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91651	0.58980	0.28517	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59011	0.93213	0.52614	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.68772	0.92420	0.48448	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57533	0.70385	0.82426	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80718	0.84446	0.78302	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93002	0.60959	0.18383	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48031	0.71872	0.06389	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92068	0.82565	0.40476	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.92028	0.71508	0.44797	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68795	0.61856	0.07019	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48602	0.86336	0.46844	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71311	0.73863	0.85546	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.81529	0.93529	0.63803	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82039	0.52224	0.13775	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.81673	0.95087	0.73932	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91538	0.82605	0.19952	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82104	0.95064	0.52017	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86234	0.79462	0.30635	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83139	0.48199	0.45050	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48470	0.82413	0.79822	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.71513	0.74197	0.06496	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.61264	0.74754	0.10008	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71901	0.96869	0.76902	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81717	0.42586	0.61119	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.47954	0.13205	0.45150	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.62244	0.05690	0.53190	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.81577	0.38771	0.51356	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70168	0.28514	0.49143	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58892	0.42086	0.84469	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.51389	0.18734	0.79982	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.71822	0.50887	0.06175	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92254	0.09202	0.49564	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81124	0.39123	0.72499	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.90859	0.35707	0.49932	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58184	0.16550	0.72980	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.55888	0.04532	0.74282	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58502	0.16152	0.52767	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.92702	0.05208	0.77117	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.78319	0.48313	0.78567	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48319	0.27946	0.07141	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59680	0.38405	0.09018	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.70901	0.24852	0.74136	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.93708	0.40525	0.76443	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54366	0.17947	0.63567	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.48377	0.75249	0.95055	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.75668	0.50232	0.94963	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.73871	0.78232	0.96679	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.37929	0.83994	0.18824	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.39585	0.95213	0.15293	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38001	0.83888	0.39286	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47845	0.72523	0.85065	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36786	0.62029	0.82501	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25196	0.75412	0.19217	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03044	0.96106	0.18665	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19631	0.52970	0.13598	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.15016	0.50491	0.45799	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02548	0.59159	0.14872	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43123	0.85558	0.28253	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13198	0.55907	0.30294	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.33002	0.93192	0.41443	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15645	0.60014	0.40026	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27554	0.70051	0.41038	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.38534	0.57298	0.07569	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.24945	0.49849	0.86201	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.04989	0.92704	0.39790	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.43893	0.79953	0.12481	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06957	0.63221	0.43225	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15113	0.60961	0.19321	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.22683	0.22128	0.94965	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.47544	0.24201	0.97323	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.21744	0.51200	0.97303	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.91041	0.71832	0.56282	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.67680	0.59030	0.55708	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.88130	0.70154	0.62538	Biso	1.000	O
H2	1.0000	0.76669	0.64124	0.60335	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.68611	0.52226	0.53077	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.69371	0.65704	0.51045	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.89358	0.77194	0.65042	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.33368	0.42958	0.62702	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.35145	0.37438	0.66694	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.35408	0.50419	0.66579	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.24403	0.38587	0.61425	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.56646	0.53694	0.28562	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.47468	0.40722	0.41652	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.49350	0.34751	0.38557	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.42014	0.38201	0.49803	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.39592	0.30245	0.52984	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.39680	0.45886	0.54052	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.59722	0.56603	0.62173	Biso	1.000	C
C8	1.0000	0.42628	0.55993	0.49633	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.40677	0.61932	0.52705	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.48087	0.58489	0.41487	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.50519	0.66448	0.38310	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.50700	0.50947	0.37373	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.60169	0.48307	0.27230	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.63389	0.62400	0.28381	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.50867	0.52517	0.23133	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.57514	0.62758	0.64296	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.56561	0.49162	0.66259	Biso	1.000	H

TS-MS1/C3 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05906	0.19490	0.52784	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.10131	0.32172	0.52049	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.31299	0.42281	0.86233	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13745	0.46938	0.81119	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25386	0.28930	0.06874	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.18729	0.13462	0.29175	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04918	0.18811	0.73353	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15698	0.08807	0.19597	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15753	0.07737	0.40162	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.07963	0.16642	0.62368	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.26387	0.29391	0.86510	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35870	0.26875	0.84604	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24439	0.05621	0.16206	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48150	0.21491	0.14893	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.06928	0.42840	0.53685	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.17336	0.23588	0.79375	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.27085	0.52665	0.07598	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37971	0.08627	0.19479	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24555	0.40781	0.09929	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.00402	0.28826	0.73200	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39576	0.09770	0.31065	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12806	0.16874	0.46254	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09547	0.47357	0.64921	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.38417	0.08765	0.41264	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28830	0.10418	0.44590	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39472	0.32505	0.08524	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04613	0.41554	0.73976	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.49089	0.28644	0.87169	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15989	0.18069	0.13641	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93480	0.62672	0.40715	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.71626	0.52457	0.85882	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59829	0.95785	0.73418	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.71571	0.63207	0.83300	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96417	0.75451	0.16862	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82375	0.84873	0.12569	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.58046	0.90543	0.62451	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86616	0.89089	0.47672	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.91913	0.60803	0.28995	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59604	0.94917	0.52767	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.70328	0.96041	0.48667	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57502	0.72824	0.84871	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80443	0.85642	0.78134	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93683	0.63367	0.18949	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48843	0.75334	0.06497	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92665	0.84695	0.40831	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90791	0.72748	0.44734	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69129	0.64522	0.08391	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49587	0.86331	0.47138	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71414	0.75504	0.85801	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82833	0.96567	0.64220	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82962	0.54874	0.13925	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82658	0.97036	0.74384	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92309	0.85292	0.20345	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.83438	0.98264	0.52508	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86823	0.82515	0.30939	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83795	0.49545	0.45443	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49403	0.85019	0.79845	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72782	0.76987	0.06447	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62690	0.78667	0.08267	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73264	0.99370	0.77538	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82620	0.44426	0.61679	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.49432	0.18069	0.45420	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.60154	0.06361	0.52653	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.83017	0.40663	0.52040	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.72267	0.29648	0.49844	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.59481	0.42562	0.84896	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.50858	0.19391	0.80258	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.72300	0.53632	0.06831	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.93241	0.12777	0.50565	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.82008	0.41789	0.73214	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.93007	0.38605	0.50871	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58985	0.18889	0.73475	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57789	0.07243	0.74135	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59285	0.18590	0.53074	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.94054	0.06343	0.78007	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79620	0.51055	0.79578	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49348	0.30176	0.07891	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60185	0.41183	0.09907	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71240	0.27907	0.75566	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94796	0.43183	0.76804	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55750	0.20732	0.63978	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.46641	0.78195	0.95514	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.75778	0.53144	0.95577	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76557	0.79951	0.96654	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38970	0.86917	0.19714	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40386	0.97864	0.15746	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.39285	0.86731	0.40502	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47693	0.75208	0.85758	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36774	0.64748	0.82708	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26337	0.78002	0.19941	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03945	0.98687	0.18906	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.20601	0.55796	0.14169	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.16450	0.53835	0.46813	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03469	0.61833	0.15576	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43816	0.88947	0.29283	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.14143	0.58428	0.31087	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.36266	0.97040	0.44207	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16211	0.62811	0.40793	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27832	0.73304	0.41511	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39922	0.60789	0.08617	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26270	0.51849	0.86887	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06110	0.93697	0.40050	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.45622	0.83045	0.13962	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07154	0.65506	0.43838	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15996	0.63622	0.20075	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.21149	0.24835	0.95764	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.49735	0.25677	0.98514	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23224	0.53251	0.98063	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.83320	0.69889	0.56866	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.49115	0.52468	0.67752	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.48852	0.49143	0.74347	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.56832	0.60484	0.67134	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.42043	0.53904	0.67116	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.58201	0.72533	0.29823	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.61986	0.59378	0.38935	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.69808	0.62478	0.35397	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.59856	0.53231	0.46549	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.66042	0.51291	0.49034	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.49872	0.49682	0.51608	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.48611	0.44264	0.60559	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.41847	0.51939	0.48392	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.34095	0.49304	0.51908	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.43884	0.58388	0.40574	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.38450	0.61699	0.39033	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.54212	0.62657	0.35868	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.63252	0.72159	0.24462	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.63552	0.80044	0.33714	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.51325	0.73356	0.27171	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.55812	0.43079	0.61503	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.42154	0.49411	0.30018	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.46641	0.52535	0.23790	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.42580	0.42361	0.32707	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.33670	0.47891	0.29308	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.37878	0.32823	0.61141	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.78949	0.66739	0.62273	Biso	1.000	O
H16	1.0000	0.37708	0.28637	0.67320	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.30478	0.33736	0.61009	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.37277	0.27404	0.55651	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.82097	0.72894	0.66462	Biso	1.000	H

TS-MS2/C3 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05279	0.18932	0.52788	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09653	0.31653	0.51831	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.30837	0.41566	0.86156	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13351	0.46388	0.81091	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25182	0.28586	0.06847	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.18047	0.13142	0.29359	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04255	0.18189	0.73463	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15066	0.08505	0.19756	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15232	0.07094	0.40237	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.07310	0.16237	0.62413	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25828	0.28667	0.86520	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35229	0.26020	0.84607	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.23612	0.04999	0.16462	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47504	0.20893	0.14833	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.06514	0.42397	0.53593	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16697	0.22880	0.79427	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26547	0.52204	0.07667	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37262	0.08138	0.19486	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24553	0.40497	0.09933	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.99763	0.28213	0.73383	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39122	0.09575	0.31037	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12247	0.16210	0.46387	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09063	0.46586	0.64886	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.38003	0.08391	0.41221	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28420	0.10032	0.44621	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39290	0.32132	0.08158	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04146	0.40981	0.74010	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48545	0.27915	0.87093	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15819	0.17972	0.13814	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92678	0.61983	0.40642	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.70989	0.51837	0.85730	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59202	0.95063	0.73353	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.70912	0.62534	0.82970	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96096	0.75362	0.17227	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81700	0.84203	0.12548	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.57399	0.89802	0.62378	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.86676	0.88846	0.47978	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.90946	0.60081	0.28947	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.58995	0.94165	0.52685	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69651	0.95119	0.48557	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57150	0.72476	0.85103	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.79827	0.84955	0.77879	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.93179	0.63157	0.18993	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48412	0.75091	0.06414	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.92259	0.84238	0.40873	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90179	0.72180	0.44676	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.68332	0.63895	0.08218	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.48891	0.85673	0.47073	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71009	0.74916	0.85725	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82174	0.96282	0.64189	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82679	0.54896	0.13643	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82005	0.96436	0.74359	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91692	0.85052	0.20455	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82869	0.97722	0.52472	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.86248	0.82304	0.31078	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.82988	0.48954	0.45512	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.48784	0.84330	0.79787	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72321	0.76423	0.06208	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62313	0.78344	0.07540	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72578	0.98648	0.77625	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.82087	0.43632	0.61657	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.49041	0.17590	0.45416	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.59742	0.05699	0.52585	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82527	0.40085	0.51961	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.71985	0.28910	0.49706	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58821	0.41908	0.84876	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.50443	0.18814	0.80089	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.71758	0.53184	0.06671	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92640	0.12286	0.50526	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81507	0.41092	0.73198	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.92725	0.38384	0.50641	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58569	0.18250	0.73348	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57164	0.06519	0.73969	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.58940	0.17976	0.52955	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93384	0.05689	0.78058	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.78933	0.50273	0.79484	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.48997	0.29547	0.07704	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.60000	0.40397	0.09672	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.70870	0.27115	0.75490	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94443	0.42815	0.76777	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55484	0.20234	0.63840	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45598	0.77340	0.95419	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.75253	0.52772	0.95405	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.76609	0.79326	0.96494	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38760	0.86579	0.19507	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.39485	0.97313	0.15737	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.38749	0.86262	0.40341	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47115	0.74550	0.85725	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.36425	0.63977	0.82466	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26361	0.77088	0.19457	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03153	0.98626	0.18988	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19142	0.54492	0.13930	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.16106	0.53442	0.46748	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.03077	0.61766	0.15733	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.43383	0.88561	0.29154	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.13679	0.57899	0.30993	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.35821	0.96633	0.44056	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.15599	0.62284	0.40690	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27051	0.72989	0.41416	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39158	0.60820	0.09159	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.25902	0.51210	0.86827	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.05764	0.93019	0.39915	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46108	0.83651	0.13692	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.06291	0.64594	0.43730	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.15474	0.62988	0.19941	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.20633	0.24267	0.95810	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.49293	0.24811	0.98393	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23092	0.52809	0.97994	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.83041	0.69603	0.56997	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.48239	0.51738	0.67591	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.47699	0.48378	0.74220	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.55979	0.59755	0.67107	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.41196	0.53198	0.66763	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.56749	0.71580	0.29078	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.61546	0.59997	0.39206	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.69617	0.63504	0.35990	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.59383	0.53161	0.46779	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.65921	0.51704	0.49198	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.49532	0.48978	0.51511	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.47998	0.43560	0.60492	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.41130	0.51111	0.48071	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.33792	0.49087	0.51988	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.43431	0.58220	0.40528	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.37722	0.61212	0.39050	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.54002	0.63059	0.36203	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.62946	0.71772	0.24543	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.60244	0.79933	0.31994	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.49277	0.69873	0.25393	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.55239	0.42482	0.61586	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.34512	0.42531	0.37460	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.40573	0.40316	0.35153	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.27876	0.36162	0.41508	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.30774	0.44925	0.32150	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.37321	0.32086	0.61046	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.78730	0.66421	0.62422	Biso	1.000	O
H16	1.0000	0.37036	0.27993	0.67303	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.29853	0.32885	0.60760	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.36887	0.26599	0.55673	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.81643	0.72650	0.66536	Biso	1.000	H

TS-MS3/C3 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05157	0.18647	0.52581	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09320	0.31306	0.51494	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.30125	0.40603	0.83315	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.13754	0.47852	0.81005	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.25234	0.28519	0.06766	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.17675	0.12688	0.28711	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.04850	0.17927	0.73229	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.15320	0.07850	0.19145	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.15260	0.07098	0.39739	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08045	0.16435	0.62096	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.25762	0.28206	0.85997	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.35366	0.25642	0.85308	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24332	0.04769	0.16390	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.47945	0.20857	0.14746	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.05498	0.41484	0.53593	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.16501	0.20354	0.79555	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26804	0.51528	0.07772	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.37961	0.08159	0.19544	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24850	0.40152	0.11192	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.01566	0.28786	0.73878	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.39917	0.10031	0.31070	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.11608	0.15756	0.45798	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.09348	0.46529	0.64635	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.37578	0.07892	0.41109	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.28705	0.10835	0.44143	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.39127	0.31306	0.07526	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.04757	0.41285	0.73939	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.48863	0.27834	0.87181	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.15756	0.16873	0.12825	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.92966	0.62048	0.40053	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.70870	0.51598	0.85522	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.59131	0.94627	0.73396	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.71008	0.62359	0.82631	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.95388	0.74111	0.16410	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.81804	0.84319	0.12602	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.56952	0.89606	0.62318	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.87202	0.88998	0.47255	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.89095	0.59250	0.28665	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.59598	0.94619	0.52789	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69459	0.93937	0.48691	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.57608	0.72533	0.85523	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.80354	0.84922	0.78250	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.92616	0.62094	0.18825	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.48462	0.74598	0.06660	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.93034	0.84179	0.40626	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.90764	0.72170	0.44702	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.69130	0.63842	0.08714	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49315	0.87679	0.46898	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.71359	0.74729	0.85837	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82051	0.94752	0.63989	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.82909	0.53550	0.12928	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.82122	0.95952	0.74106	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.91949	0.84383	0.19968	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.82926	0.97110	0.52398	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87251	0.82019	0.30763	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.84983	0.49389	0.45802	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.49029	0.84152	0.80205	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.72634	0.76130	0.06286	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62324	0.77618	0.07253	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.72662	0.98205	0.77133	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.81184	0.43348	0.61854	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.48479	0.15723	0.46094	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.62622	0.07037	0.53182	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.82135	0.39792	0.52277	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.70876	0.29902	0.49201	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.58676	0.41803	0.84435	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.50523	0.18575	0.80248	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.71858	0.52784	0.06641	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92361	0.11843	0.50982	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.81411	0.40667	0.73304	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.91077	0.36080	0.51985	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.58720	0.17811	0.73722	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.57197	0.06075	0.74637	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59294	0.17768	0.53220	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.93408	0.05651	0.77412	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79001	0.49967	0.79561	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49291	0.29441	0.07624	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.59746	0.40587	0.10011	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.71007	0.26701	0.75889	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.94397	0.42175	0.76343	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.55775	0.19623	0.64140	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.45168	0.76414	0.95666	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.74770	0.52401	0.95278	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.77017	0.78751	0.96601	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.38816	0.86163	0.19200	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40483	0.97486	0.15975	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.37923	0.85732	0.40501	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.47341	0.74233	0.85964	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.37047	0.63668	0.82256	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26447	0.77008	0.17694	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.03753	0.97543	0.18183	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.18309	0.54030	0.12310	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.13637	0.52250	0.46121	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.02926	0.60895	0.16783	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.41829	0.86751	0.29198	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.17033	0.58934	0.30406	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.33641	0.95450	0.43265	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16140	0.62275	0.40097	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27538	0.72054	0.43132	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39041	0.60624	0.10042	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26313	0.50752	0.86128	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.06538	0.92878	0.39838	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.46904	0.83703	0.13906	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07296	0.65876	0.40876	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16076	0.62826	0.19342	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.20914	0.26166	0.95530	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.50583	0.25180	0.98389	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.24812	0.51082	0.97659	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.83516	0.69340	0.56729	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.45856	0.35927	0.61598	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.42161	0.32253	0.67995	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.42617	0.29117	0.56776	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.54878	0.39435	0.62164	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.61116	0.74911	0.29402	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.61738	0.61073	0.40023	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.70228	0.64088	0.37813	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.57341	0.53276	0.46637	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.62382	0.50254	0.49766	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.46227	0.49580	0.49918	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.42929	0.44929	0.59248	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.39932	0.53817	0.45536	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.32164	0.52294	0.48512	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.44679	0.61808	0.38616	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.39709	0.64954	0.35598	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.55577	0.65772	0.36063	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.63794	0.71928	0.23749	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.68662	0.81893	0.32209	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.55599	0.77899	0.27161	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.33856	0.41369	0.59875	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.36129	0.39149	0.41280	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.40825	0.40917	0.35152	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.36055	0.32462	0.45121	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.27585	0.37352	0.40403	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.48791	0.55058	0.65594	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.78998	0.66369	0.62095	Biso	1.000	O
H16	1.0000	0.46687	0.52199	0.72431	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.57857	0.59157	0.64848	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.46130	0.61179	0.64305	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.82112	0.72615	0.66197	Biso	1.000	H

TS9-10/C3 in PX -based pathway

data_image0

_cell_length_a 13.8042
 _cell_length_b 13.8042
 _cell_length_c 15.044
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_B_iso_or_equiv
 _atom_site_type_symbol

P1	1.0000	0.05570	0.19055	0.52077	Biso	1.000	P
O1	1.0000	0.09365	0.31554	0.51214	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.28768	0.40443	0.84491	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.15490	0.50451	0.79583	Biso	1.000	O
Al1	1.0000	0.26506	0.28667	0.06221	Biso	1.000	Al
O4	1.0000	0.18880	0.13294	0.28365	Biso	1.000	O
Al2	1.0000	0.06297	0.18704	0.72854	Biso	1.000	Al
P2	1.0000	0.16162	0.08405	0.18845	Biso	1.000	P
Al3	1.0000	0.16201	0.07911	0.39414	Biso	1.000	Al
O5	1.0000	0.08205	0.16510	0.61587	Biso	1.000	O
P3	1.0000	0.27057	0.28532	0.85339	Biso	1.000	P
O6	1.0000	0.38003	0.28937	0.82537	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.24990	0.05131	0.15863	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.48912	0.20957	0.14011	Biso	1.000	O
Al4	1.0000	0.06366	0.42307	0.52732	Biso	1.000	Al
O9	1.0000	0.17841	0.20373	0.78972	Biso	1.000	O
P4	1.0000	0.26900	0.52042	0.06868	Biso	1.000	P
Al5	1.0000	0.38643	0.08411	0.18993	Biso	1.000	Al

O10	1.0000	0.24653	0.40096	0.08388	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.04320	0.30284	0.74212	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.40527	0.10567	0.30533	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.12164	0.16340	0.45333	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.08334	0.46534	0.63996	Biso	1.000	O
P5	1.0000	0.38767	0.08877	0.40660	Biso	1.000	P
O15	1.0000	0.29376	0.10933	0.43909	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.40567	0.32795	0.08871	Biso	1.000	O
P6	1.0000	0.05812	0.42143	0.73650	Biso	1.000	P
AI6	1.0000	0.50211	0.29644	0.86661	Biso	1.000	AI
O17	1.0000	0.16643	0.17463	0.12527	Biso	1.000	O
AI7	1.0000	0.93852	0.62621	0.40472	Biso	1.000	AI
P7	1.0000	0.73350	0.52816	0.85975	Biso	1.000	P
AI8	1.0000	0.60315	0.95700	0.73656	Biso	1.000	AI
O18	1.0000	0.74416	0.64011	0.83003	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.96401	0.74978	0.16406	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.82294	0.84339	0.12951	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.58387	0.92399	0.62275	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.87752	0.89128	0.47761	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.92390	0.60925	0.28865	Biso	1.000	O
P8	1.0000	0.60205	0.95243	0.52249	Biso	1.000	P
O24	1.0000	0.69851	0.93807	0.48643	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.59439	0.72776	0.84566	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.82139	0.86045	0.78098	Biso	1.000	O
P9	1.0000	0.94150	0.63136	0.18779	Biso	1.000	P
AI9	1.0000	0.49248	0.74704	0.06289	Biso	1.000	AI
Si1	1.0000	0.93618	0.84821	0.40667	Biso	1.000	Si
O27	1.0000	0.91954	0.73068	0.45041	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.70273	0.64084	0.07648	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.49452	0.86948	0.47309	Biso	1.000	O
AI10	1.0000	0.73425	0.75863	0.85877	Biso	1.000	AI
O30	1.0000	0.82873	0.95631	0.63927	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.83500	0.54114	0.13998	Biso	1.000	O
P10	1.0000	0.83335	0.96943	0.74066	Biso	1.000	P
AI11	1.0000	0.92702	0.84988	0.20196	Biso	1.000	AI
AI12	1.0000	0.83526	0.97691	0.52232	Biso	1.000	AI
O32	1.0000	0.87622	0.82296	0.30928	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.83601	0.49945	0.45487	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.50221	0.83834	0.79269	Biso	1.000	O
P11	1.0000	0.73406	0.76486	0.06350	Biso	1.000	P
O35	1.0000	0.62851	0.77367	0.07869	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.73766	0.98863	0.77355	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.84953	0.45829	0.61634	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.49706	0.17595	0.45305	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.63047	0.07475	0.50649	Biso	1.000	O
P12	1.0000	0.83292	0.41177	0.51972	Biso	1.000	P
O40	1.0000	0.71711	0.30741	0.51089	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.60730	0.43863	0.85916	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.53012	0.21239	0.79702	Biso	1.000	O
AI13	1.0000	0.73452	0.53238	0.06447	Biso	1.000	AI
O43	1.0000	0.92758	0.12215	0.50375	Biso	1.000	O
AI14	1.0000	0.83022	0.41186	0.72826	Biso	1.000	AI
O44	1.0000	0.92427	0.38168	0.49676	Biso	1.000	O
P13	1.0000	0.59578	0.18087	0.73235	Biso	1.000	P
O45	1.0000	0.58241	0.06867	0.76349	Biso	1.000	O
AI15	1.0000	0.59628	0.17938	0.52729	Biso	1.000	AI
O46	1.0000	0.94568	0.06806	0.77218	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.79823	0.49812	0.79236	Biso	1.000	O
P14	1.0000	0.49891	0.29815	0.07280	Biso	1.000	P
O48	1.0000	0.61301	0.40431	0.08566	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.72180	0.27054	0.73218	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.95025	0.41623	0.77079	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.54641	0.16931	0.63763	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.47700	0.77420	0.95047	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.78262	0.53698	0.95382	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.77969	0.80333	0.96774	Biso	1.000	O
P15	1.0000	0.39809	0.86512	0.19200	Biso	1.000	P
O55	1.0000	0.40808	0.97425	0.15535	Biso	1.000	O
AI16	1.0000	0.39288	0.86483	0.40008	Biso	1.000	AI
P16	1.0000	0.49156	0.74442	0.85410	Biso	1.000	P
O56	1.0000	0.38845	0.63526	0.82293	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27375	0.77113	0.18876	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.04408	0.98227	0.18201	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.19473	0.54110	0.13283	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.16463	0.53393	0.46380	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.04114	0.61944	0.15484	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.44177	0.88306	0.28915	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.14590	0.58333	0.30673	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.35948	0.96810	0.43145	Biso	1.000	O
P17	1.0000	0.16506	0.62498	0.40412	Biso	1.000	P
O65	1.0000	0.27935	0.73122	0.41430	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.39492	0.60460	0.08576	Biso	1.000	O
AI17	1.0000	0.26586	0.51816	0.86082	Biso	1.000	AI
O67	1.0000	0.07008	0.93734	0.39694	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.47170	0.83534	0.13435	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.07270	0.64959	0.43503	Biso	1.000	O
AI18	1.0000	0.16512	0.62993	0.19557	Biso	1.000	AI
O70	1.0000	0.23839	0.24284	0.94985	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.48854	0.25023	0.97745	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.23750	0.53363	0.97223	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.90844	0.73446	0.56386	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.59727	0.46019	0.62546	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.53865	0.38081	0.59468	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.67477	0.45841	0.63669	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.56650	0.47003	0.68937	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.55932	0.60156	0.26761	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.45531	0.44221	0.37621	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.46552	0.38669	0.33086	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.40598	0.40243	0.45904	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.37806	0.31648	0.47705	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.39332	0.47222	0.52011	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.62830	0.55558	0.56561	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.42743	0.58207	0.49370	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.41638	0.63725	0.53881	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.47772	0.62207	0.41151	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.50724	0.70845	0.39387	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.49468	0.55376	0.35205	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.52653	0.54166	0.21299	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.64722	0.62577	0.27739	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.55828	0.67708	0.24808	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.63923	0.54350	0.49571	Biso	1.000	H
C10	1.0000	0.34440	0.43108	0.61117	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.32800	0.34623	0.62313	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.40031	0.48528	0.66345	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.26608	0.43121	0.61933	Biso	1.000	H
C11	1.0000	0.66538	0.66372	0.59534	Biso	1.000	C
O73	1.0000	0.88171	0.72194	0.62699	Biso	1.000	O
H16	1.0000	0.76414	0.68557	0.60967	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.63861	0.67394	0.66097	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.67646	0.72564	0.54600	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.91348	0.79547	0.65430	Biso	1.000	H