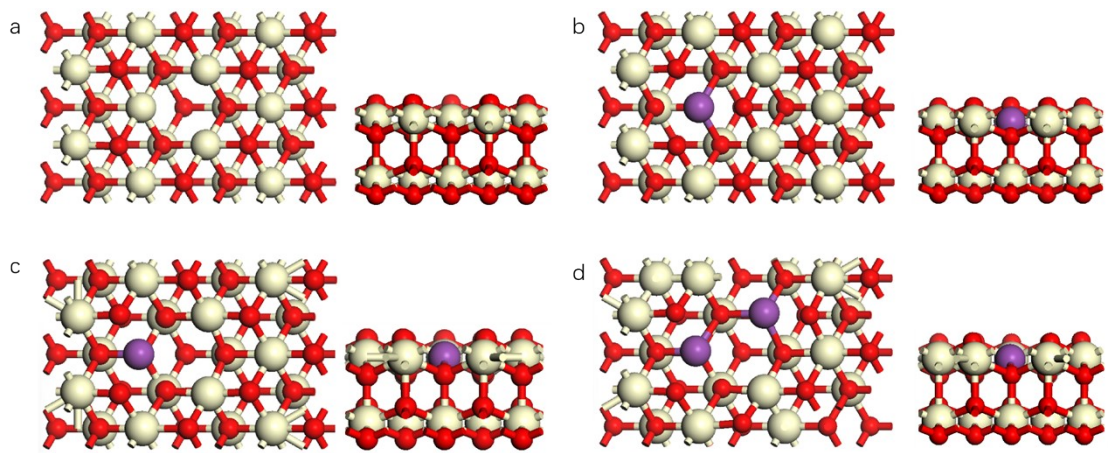


## Supporting Information

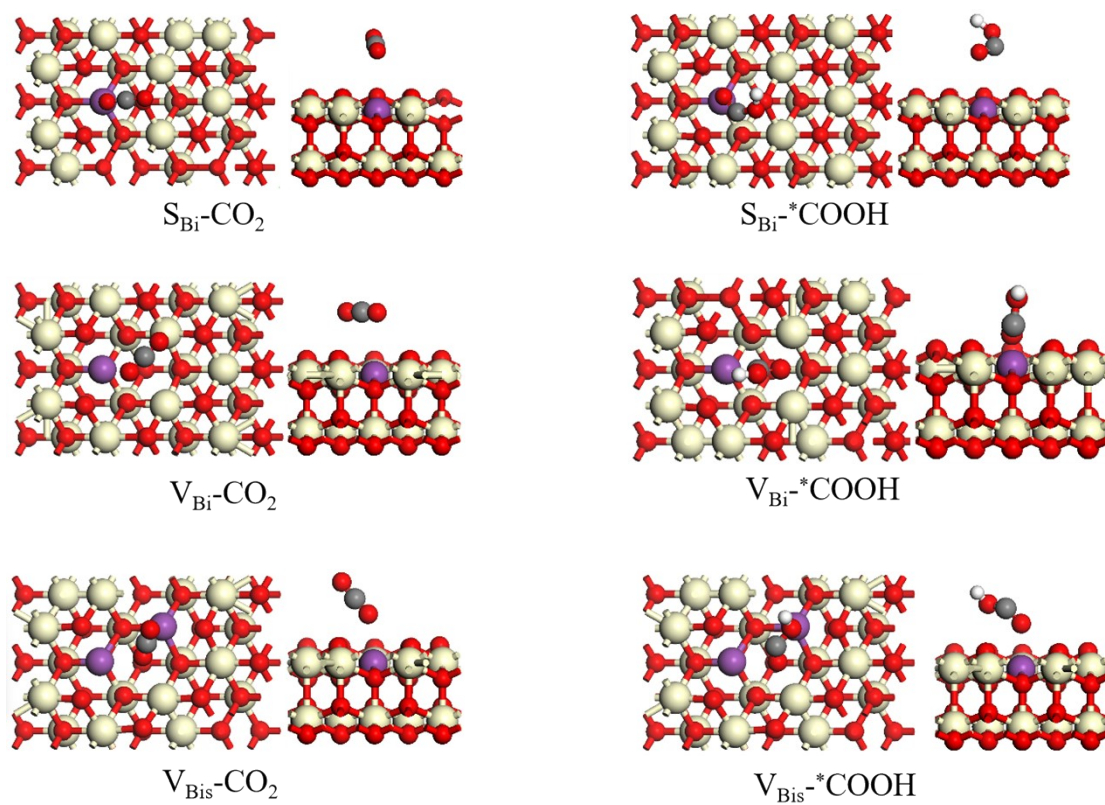
# Improved photocatalytic carbon dioxide reduction over Bi-doped CeO<sub>2</sub> by strain engineering

Ang Tian,<sup>a</sup> Ziyu Mei,<sup>b</sup> Luyuan Wang,<sup>b</sup> Guangliang Liu,<sup>c</sup> Zhiguo Liu,<sup>d</sup> Guangming Kong,<sup>d</sup> Wenjun Tang<sup>\*c</sup> and Chuangwei Liu<sup>\*b</sup>

- a. Liaoning Provincial Key Laboratory of Metallurgical Resources Circulation Science, Northeastern University, Shenyang, 110819 P. R. China
- b. State Key Laboratory of Catalysis, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China. Email: cwliu@dicp.ac.cn
- c. Sichuan Anxinda Rare Earth Technology Co., Ltd., Ya'an, 625400, P. R. China
- d. Naval Aviation University Qingdao Campus, Qingdao Shandong 266041, China
- e. School of Materials and Energy, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, P.R. China.



**Figure S1.** the side and top views of four potential models.



**Figure S2.** the first reduction step ( $\text{CO}_2 \rightarrow ^*\text{COOH}$ ) on the three promise surfaces.

**Table S1.** The atomic coordinates of all the optimized systems for electronic structure calculations.

S <sub>Bi</sub>			
Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33403	0.00000	0.35147
Ce4	0.83343	0.50000	0.35057
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08172	0.24963	0.35023
Ce8	0.58503	0.74920	0.35087
Ce9	0.16667	0.00000	0.19200
Ce10	0.66667	0.50000	0.19200
Ce11	0.83336	0.00000	0.35046
Ce12	0.91667	0.25000	0.19200
Ce13	0.41667	0.75000	0.19200
Ce14	0.58503	0.25080	0.35087
Ce15	0.08172	0.75037	0.35023
Bi1	0.33381	0.50000	0.35028
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24743	0.24121	0.39152
O4	0.74901	0.75000	0.39062
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.41788	0.24881	0.30955
O8	0.91618	0.75011	0.30927
O9	0.83333	0.00000	0.23199

O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.49874	0.00000	0.39059
O12	0.99689	0.50000	0.39051
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66701	0.00000	0.30940
O16	0.16381	0.50000	0.30964
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74901	0.25000	0.39062
O20	0.24743	0.75879	0.39152
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91618	0.24988	0.30927
O24	0.41788	0.75119	0.30955
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99681	0.00000	0.39047
O28	0.50704	0.50000	0.39228
O29	0.50000	0.00000	0.15201
O30	0.00000	0.50000	0.15201
O31	0.16438	0.00000	0.30966
O32	0.66806	0.50000	0.30704

S<sub>Bi</sub>-CO<sub>2</sub>

Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200

Ce3	0.33306	0.99993	0.35150
Ce4	0.83296	0.50003	0.35062
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08125	0.24889	0.35038
Ce8	0.58463	0.74846	0.35108
Ce9	0.16667	0.00000	0.19200
Ce10	0.66667	0.50000	0.19200
Ce11	0.83270	0.99999	0.35060
Ce12	0.91667	0.25000	0.19200
Ce13	0.41667	0.75000	0.19200
Ce14	0.58466	0.25145	0.35105
Ce15	0.08130	0.75112	0.35040
Bi1	0.33172	0.49982	0.34960
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24628	0.23873	0.39081
O4	0.74890	0.74992	0.39061
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.41757	0.25044	0.30966
O8	0.91604	0.75041	0.30926
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.49707	0.99989	0.39077
O12	0.99696	0.50002	0.39027
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201

O15	0.66631	0.00001	0.30968
O16	0.16479	0.50007	0.30991
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74887	0.25012	0.39064
O20	0.24635	0.76134	0.39096
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91602	0.24962	0.30927
O24	0.41756	0.74948	0.30966
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99682	0.00002	0.39068
O28	0.50913	0.49997	0.39366
O29	0.50000	0.00000	0.15201
O30	0.00000	0.50000	0.15201
O31	0.16366	0.99992	0.30920
O32	0.66784	0.49999	0.30890
O33	0.34894	0.49819	0.52692
O34	0.51497	0.52466	0.56587
C1	0.43226	0.51136	0.54490

S<sub>Bi</sub><sup>-</sup>\*COOH

Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33360	0.00074	0.35125
Ce4	0.83330	0.49982	0.35054
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200

Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08125	0.24859	0.35048
Ce8	0.58496	0.74790	0.35102
Ce9	0.16667	0.00000	0.19200
Ce10	0.66667	0.50000	0.19200
Ce11	0.83228	0.00027	0.35033
Ce12	0.91667	0.25000	0.19200
Ce13	0.41667	0.75000	0.19200
Ce14	0.58466	0.25225	0.35098
Ce15	0.08105	0.75180	0.35039
Bi1	0.33048	0.50140	0.35033
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24686	0.23787	0.39181
O4	0.74845	0.75012	0.39103
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.41735	0.25082	0.30961
O8	0.91583	0.75011	0.30923
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.49763	0.00114	0.39077
O12	0.99682	0.50004	0.39050
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66666	0.00006	0.30957
O16	0.16486	0.49922	0.31002
O17	0.08333	0.25000	0.23199



O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74920	0.25018	0.39081
O20	0.24544	0.76272	0.38936
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91602	0.24996	0.30915
O24	0.41796	0.74929	0.30994
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99651	0.00008	0.39068
O28	0.51122	0.49870	0.39334
O29	0.50000	0.00000	0.15201
O30	0.00000	0.50000	0.15201
O31	0.16324	0.00145	0.30897
O32	0.66813	0.50025	0.30863
O33	0.33818	0.53478	0.52018
O34	0.47532	0.43753	0.57861
C1	0.39539	0.41942	0.53654
H1	0.47842	0.54982	0.61200

$V_{\text{Bis}}$

Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33141	0.00000	0.35905
Ce4	0.83404	0.50051	0.35877
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08160	0.24571	0.35815

Ce8	0.16667	0.00000	0.19200
Ce9	0.66667	0.50000	0.19200
Ce10	0.83743	0.99643	0.35972
Ce11	0.91667	0.25000	0.19200
Ce12	0.41667	0.75000	0.19200
Ce13	0.58745	0.23332	0.35524
Ce14	0.08208	0.75428	0.35827
Bi1	0.58653	0.76529	0.35694
Bi2	0.31949	0.50849	0.35677
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24098	0.23045	0.40299
O4	0.76355	0.74929	0.40347
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42176	0.25583	0.31766
O8	0.91911	0.75090	0.31372
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.50146	0.02119	0.40630
O12	0.99628	0.49921	0.40080
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66674	0.99395	0.31381
O16	0.16609	0.50045	0.31452
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74806	0.24020	0.40154

O20	0.24067	0.76816	0.40405
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91672	0.24793	0.31518
O24	0.41635	0.75456	0.31810
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99833	0.99930	0.40202
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16343	0.00048	0.31258
O31	0.65992	0.49209	0.31993

$V_{\text{Bis-CO}_2}$

Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33141	0.00000	0.35905
Ce4	0.83404	0.50051	0.35877
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08160	0.24571	0.35815
Ce8	0.16667	0.00000	0.19200
Ce9	0.66667	0.50000	0.19200
Ce10	0.83743	0.99643	0.35972
Ce11	0.91667	0.25000	0.19200
Ce12	0.41667	0.75000	0.19200
Ce13	0.58745	0.23332	0.35524
Ce14	0.08208	0.75428	0.35827

Bi1	0.58653	0.76529	0.35694
Bi2	0.31949	0.50849	0.35677
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24079	0.22979	0.40297
O4	0.76384	0.74908	0.40420
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42176	0.25583	0.31766
O8	0.91911	0.75089	0.31372
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.50182	0.02008	0.40681
O12	0.99636	0.49945	0.40086
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66674	0.99395	0.31381
O16	0.16609	0.50045	0.31452
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74837	0.24026	0.40162
O20	0.24098	0.76845	0.40451
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91672	0.24793	0.31518
O24	0.41635	0.75456	0.31810
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199

O27	0.99833	0.99888	0.40306
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16343	0.00048	0.31258
O31	0.65992	0.49209	0.31993
O32	0.50197	0.54705	0.49924
O33	0.53325	0.74237	0.59197
C1	0.51766	0.64517	0.54376

V<sub>Bis</sub>-\*COOH

Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33141	0.00000	0.35905
Ce4	0.83404	0.50051	0.35877
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08160	0.24571	0.35815
Ce8	0.16667	0.00000	0.19200
Ce9	0.66667	0.50000	0.19200
Ce10	0.83743	0.99643	0.35972
Ce11	0.91667	0.25000	0.19200
Ce12	0.41667	0.75000	0.19200
Ce13	0.58745	0.23332	0.35524
Ce14	0.08208	0.75428	0.35827
Bi1	0.58653	0.76529	0.35694
Bi2	0.31949	0.50849	0.35677
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199

O3	0.24031	0.22966	0.40306
O4	0.76424	0.74933	0.40386
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42176	0.25583	0.31766
O8	0.91911	0.75089	0.31372
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.50101	0.01997	0.40673
O12	0.99625	0.49947	0.40114
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66674	0.99395	0.31381
O16	0.16609	0.50045	0.31452
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74844	0.23945	0.40173
O20	0.24078	0.76845	0.40467
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91672	0.24793	0.31518
O24	0.41635	0.75456	0.31810
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99864	0.99882	0.40326
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16343	0.00048	0.31258

O31	0.65992	0.49209	0.31993
O32	0.51146	0.50807	0.48751
O33	0.57094	0.75028	0.54356
C1	0.50369	0.62087	0.53128
H1	0.54292	0.83124	0.57594

V<sub>Bis</sub>-\*HCOOH

Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33141	0.00000	0.35905
Ce4	0.83404	0.50051	0.35877
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08160	0.24571	0.35815
Ce8	0.16667	0.00000	0.19200
Ce9	0.66667	0.50000	0.19200
Ce10	0.83743	0.99643	0.35972
Ce11	0.91667	0.25000	0.19200
Ce12	0.41667	0.75000	0.19200
Ce13	0.58745	0.23332	0.35524
Ce14	0.08208	0.75428	0.35827
Bi1	0.58653	0.76529	0.35694
Bi2	0.31949	0.50849	0.35677
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24021	0.22934	0.40350
O4	0.76447	0.74963	0.40392
O5	0.75000	0.25000	0.15201

O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42176	0.25583	0.31766
O8	0.91911	0.75089	0.31372
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.50102	0.01755	0.40716
O12	0.99653	0.49983	0.40118
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66674	0.99395	0.31381
O16	0.16609	0.50045	0.31452
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74912	0.23929	0.40136
O20	0.24141	0.76900	0.40573
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91672	0.24793	0.31518
O24	0.41635	0.75456	0.31810
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99890	0.99850	0.40331
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16343	0.00048	0.31258
O31	0.65992	0.49209	0.31993
O32	0.50233	0.47515	0.46852
O33	0.57426	0.64623	0.54962



C1	0.49322	0.58740	0.51370
H1	0.55362	0.74254	0.58025
H2	0.41924	0.64926	0.52488

V<sub>Bis</sub>\*OCHO

Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33141	0.00000	0.35905
Ce4	0.83404	0.50051	0.35877
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08160	0.24571	0.35815
Ce8	0.16667	0.00000	0.19200
Ce9	0.66667	0.50000	0.19200
Ce10	0.83743	0.99643	0.35972
Ce11	0.91667	0.25000	0.19200
Ce12	0.41667	0.75000	0.19200
Ce13	0.58745	0.23332	0.35524
Ce14	0.08208	0.75428	0.35827
Bi1	0.58653	0.76529	0.35694
Bi2	0.31949	0.50849	0.35677
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.23957	0.23030	0.40225
O4	0.75704	0.75109	0.40075
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42176	0.25583	0.31766

O8	0.91911	0.75089	0.31372
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.50334	0.00200	0.40084
O12	0.99450	0.50049	0.40113
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66674	0.99395	0.31381
O16	0.16609	0.50045	0.31452
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.75099	0.24159	0.39958
O20	0.24023	0.77021	0.40397
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91672	0.24793	0.31518
O24	0.41635	0.75456	0.31810
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99760	0.99800	0.40296
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16343	0.00048	0.31258
O31	0.65992	0.49209	0.31993
O32	0.50837	0.40726	0.44849
O33	0.55708	0.67949	0.48334
C1	0.53030	0.52213	0.49484
H1	0.52411	0.48038	0.54772

$V_{Bi}$			
Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33106	0.00000	0.35888
Ce4	0.83446	0.50000	0.35857
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08140	0.24528	0.35815
Ce8	0.58794	0.76652	0.35423
Ce9	0.16667	0.00000	0.19200
Ce10	0.66667	0.50000	0.19200
Ce11	0.83666	0.00000	0.35813
Ce12	0.91667	0.25000	0.19200
Ce13	0.41667	0.75000	0.19200
Ce14	0.58794	0.23348	0.35423
Ce15	0.08140	0.75472	0.35815
Bi1	0.31738	0.50000	0.35795
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24247	0.23309	0.40352
O4	0.74762	0.75409	0.40084
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42272	0.25225	0.32000
O8	0.91659	0.75114	0.31488
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.50944	0.00000	0.40369

O12	0.99524	0.50000	0.40107
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66831	0.00000	0.31183
O16	0.16542	0.50000	0.31446
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74762	0.24591	0.40084
O20	0.24247	0.76691	0.40352
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91659	0.24886	0.31488
O24	0.42272	0.74775	0.32000
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99731	0.00000	0.40301
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16362	0.00000	0.31276
O31	0.65363	0.50000	0.32058
V <sub>Bi</sub> <sup>-</sup> *CO			
Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33075	0.00049	0.35903
Ce4	0.83391	0.49990	0.35819
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08112	0.24762	0.35759

Ce8	0.58735	0.76147	0.35748
Ce9	0.16667	0.00000	0.19200
Ce10	0.66667	0.50000	0.19200
Ce11	0.83548	-0.00024	0.35708
Ce12	0.91667	0.25000	0.19200
Ce13	0.41667	0.75000	0.19200
Ce14	0.58744	0.23804	0.35711
Ce15	0.08112	0.75244	0.35756
Bi1	0.31997	0.50106	0.36475
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24081	0.23017	0.40505
O4	0.74953	0.75461	0.39977
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42302	0.24957	0.32167
O8	0.91635	0.75031	0.31417
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.51141	0.00000	0.40467
O12	0.99027	0.50011	0.40298
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66754	-0.00037	0.31296
O16	0.15647	0.50011	0.31590
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74960	0.24482	0.39948

O20	0.24110	0.76977	0.40490
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91652	0.24995	0.31421
O24	0.42297	0.75037	0.32193
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99647	0.00005	0.40120
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16503	-0.00006	0.31288
O31	0.66029	0.49996	0.31796
O32	0.55825	0.50247	0.43022
C1	0.46785	0.49268	0.45042
$V_{\text{Bi-CO}_2}$			
Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33049	-0.00039	0.35882
Ce4	0.83431	0.50001	0.35875
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08106	0.24516	0.35839
Ce8	0.58818	0.76741	0.35431
Ce9	0.16667	0.00000	0.19200
Ce10	0.66667	0.50000	0.19200
Ce11	0.83675	-0.00016	0.35814
Ce12	0.91667	0.25000	0.19200
Ce13	0.41667	0.75000	0.19200

Ce14	0.58759	0.23363	0.35456
Ce15	0.08122	0.75432	0.35845
Bi1	0.31744	0.49896	0.35831
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24199	0.23225	0.40357
O4	0.74812	0.75474	0.40046
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42236	0.25266	0.31997
O8	0.91685	0.75057	0.31484
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.50920	0.00088	0.40376
O12	0.99474	0.49951	0.40167
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66822	0.00081	0.31197
O16	0.16534	0.50011	0.31493
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74766	0.24627	0.40091
O20	0.24227	0.76766	0.40418
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91677	0.24887	0.31484
O24	0.42262	0.74732	0.32035
O25	0.33333	0.00000	0.23199

O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99747	-0.00041	0.40313
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16356	-0.00051	0.31295
O31	0.65355	0.50033	0.32175
O32	0.43343	0.48036	0.54023
O33	0.55971	0.70248	0.54210
C1	0.49621	0.59206	0.54207
V <sub>Bi<sup>-</sup></sub> *COOH			
Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33075	0.00049	0.35903
Ce4	0.83391	0.49990	0.35819
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08112	0.24762	0.35759
Ce8	0.58735	0.76147	0.35748
Ce9	0.16667	0.00000	0.19200
Ce10	0.66667	0.50000	0.19200
Ce11	0.83548	-0.00024	0.35708
Ce12	0.91667	0.25000	0.19200
Ce13	0.41667	0.75000	0.19200
Ce14	0.58744	0.23804	0.35711
Ce15	0.08112	0.75244	0.35756
Bi1	0.31997	0.50106	0.36475
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199



O3	0.24081	0.23017	0.40505
O4	0.74953	0.75461	0.39977
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.42302	0.24957	0.32167
O8	0.91635	0.75031	0.31417
O9	0.83333	0.00000	0.23199
O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.51141	0.00000	0.40467
O12	0.99027	0.50011	0.40298
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66754	-0.00037	0.31296
O16	0.15647	0.50011	0.31590
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74960	0.24482	0.39948
O20	0.24110	0.76977	0.40490
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91652	0.24995	0.31421
O24	0.42297	0.75037	0.32193
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99647	0.00005	0.40120
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16503	-0.00006	0.31288

O31	0.66029	0.49996	0.31796
O32	0.44331	0.47101	0.53924
O33	0.53825	0.50247	0.44622
C1	0.44785	0.49268	0.46942
H1	0.37137	0.46231	0.55189

$V_{\text{Bi}^-} \cdot \text{HCOOH}$

Ce1	0.66667	0	0.192
Ce2	0.16667	0.5	0.192
Ce3	0.33017	-0.00017	0.3585
Ce4	0.83382	0.5002	0.35877
Ce5	0.41667	0.25	0.192
Ce6	0.91667	0.75	0.192
Ce7	0.0809	0.24549	0.35857
Ce8	0.58718	0.76595	0.35774
Ce9	0.16667	0	0.192
Ce10	0.66667	0.5	0.192
Ce11	0.83598	0.00017	0.35805
Ce12	0.91667	0.25	0.192
Ce13	0.41667	0.75	0.192
Ce14	0.58774	0.23515	0.35372
Ce15	0.08085	0.75431	0.35851
Bi1	0.31761	0.49992	0.35744
O1	0.58333	0.25	0.23199
O2	0.08333	0.75	0.23199
O3	0.2425	0.23141	0.40506
O4	0.7484	0.7549	0.40173
O5	0.75	0.25	0.15201
O6	0.25	0.75	0.15201

O7	0.42182	0.25152	0.31918
O8	0.91654	0.75087	0.31485
O9	0.83333	0	0.23199
O10	0.33333	0.5	0.23199
O11	0.50826	0.00276	0.40597
O12	0.99437	0.5	0.40222
O13	0	0	0.15201
O14	0.5	0.5	0.15201
O15	0.66747	-0.00087	0.31276
O16	0.16481	0.49938	0.31488
O17	0.08333	0.25	0.23199
O18	0.58333	0.75	0.23199
O19	0.74755	0.24618	0.40136
O20	0.24144	0.76731	0.4043
O21	0.25	0.25	0.15201
O22	0.75	0.75	0.15201
O23	0.9165	0.24934	0.31485
O24	0.42258	0.74849	0.32086
O25	0.33333	0	0.23199
O26	0.83333	0.5	0.23199
O27	0.99705	0.00027	0.40331
O28	0.5	0	0.15201
O29	0	0.5	0.15201
O30	0.16362	0.00032	0.313
O31	0.65484	0.50097	0.32154
O32	0.49876	0.33241	0.48151
O33	0.53065	0.61995	0.49275
C1	0.51072	0.47995	0.52055

H1	0.50089	0.46167	0.57691
H2	0.48287	0.22366	0.50685
V <sub>Bi<sup>-</sup></sub> *OCHO			
Ce1	0.66667	0.00000	0.19200
Ce2	0.16667	0.50000	0.19200
Ce3	0.33159	-0.00001	0.35804
Ce4	0.83410	0.50005	0.35743
Ce5	0.41667	0.25000	0.19200
Ce6	0.91667	0.75000	0.19200
Ce7	0.08189	0.24597	0.35766
Ce8	0.58705	0.76232	0.35919
Ce9	0.16667	0.00000	0.19200
Ce10	0.66667	0.50000	0.19200
Ce11	0.83550	0.00013	0.35705
Ce12	0.91667	0.25000	0.19200
Ce13	0.41667	0.75000	0.19200
Ce14	0.58584	0.23993	0.35605
Ce15	0.08218	0.75389	0.35763
Bi1	0.32098	0.49772	0.35728
O1	0.58333	0.25000	0.23199
O2	0.08333	0.75000	0.23199
O3	0.24135	0.22940	0.40272
O4	0.75229	0.75286	0.39845
O5	0.75000	0.25000	0.15201
O6	0.25000	0.75000	0.15201
O7	0.41977	0.25196	0.31675
O8	0.91765	0.75093	0.31384
O9	0.83333	0.00000	0.23199

O10	0.33333	0.50000	0.23199
O11	0.50547	0.00642	0.39971
O12	0.99447	0.49983	0.40052
O13	0.00000	0.00000	0.15201
O14	0.50000	0.50000	0.15201
O15	0.66813	-0.00109	0.31362
O16	0.16418	0.49941	0.31468
O17	0.08333	0.25000	0.23199
O18	0.58333	0.75000	0.23199
O19	0.74924	0.24720	0.39955
O20	0.24147	0.77108	0.40247
O21	0.25000	0.25000	0.15201
O22	0.75000	0.75000	0.15201
O23	0.91658	0.24939	0.31415
O24	0.42264	0.74808	0.31974
O25	0.33333	0.00000	0.23199
O26	0.83333	0.50000	0.23199
O27	0.99719	0.00021	0.40129
O28	0.50000	0.00000	0.15201
O29	0.00000	0.50000	0.15201
O30	0.16355	0.00022	0.31199
O31	0.66027	0.50142	0.31802
O32	0.51104	0.46231	0.43618
O33	0.56082	0.70655	0.49286
C1	0.52704	0.55248	0.49278
H1	0.50761	0.48581	0.54214