

Supporting information

Nature of Rutile Nuclei in Anatase-to-Rutile Phase Transition

Sheng-Cai Zhu, Song-Hai Xie, Zhi-Pan Liu*

Collaborative Innovation Center of Chemistry for Energy Material, Shanghai Key Laboratory of Molecular Catalysis and Innovative Materials, Key Laboratory of Computational Physical Science (Ministry of Education), Department of Chemistry, Fudan University, Shanghai 200433, China

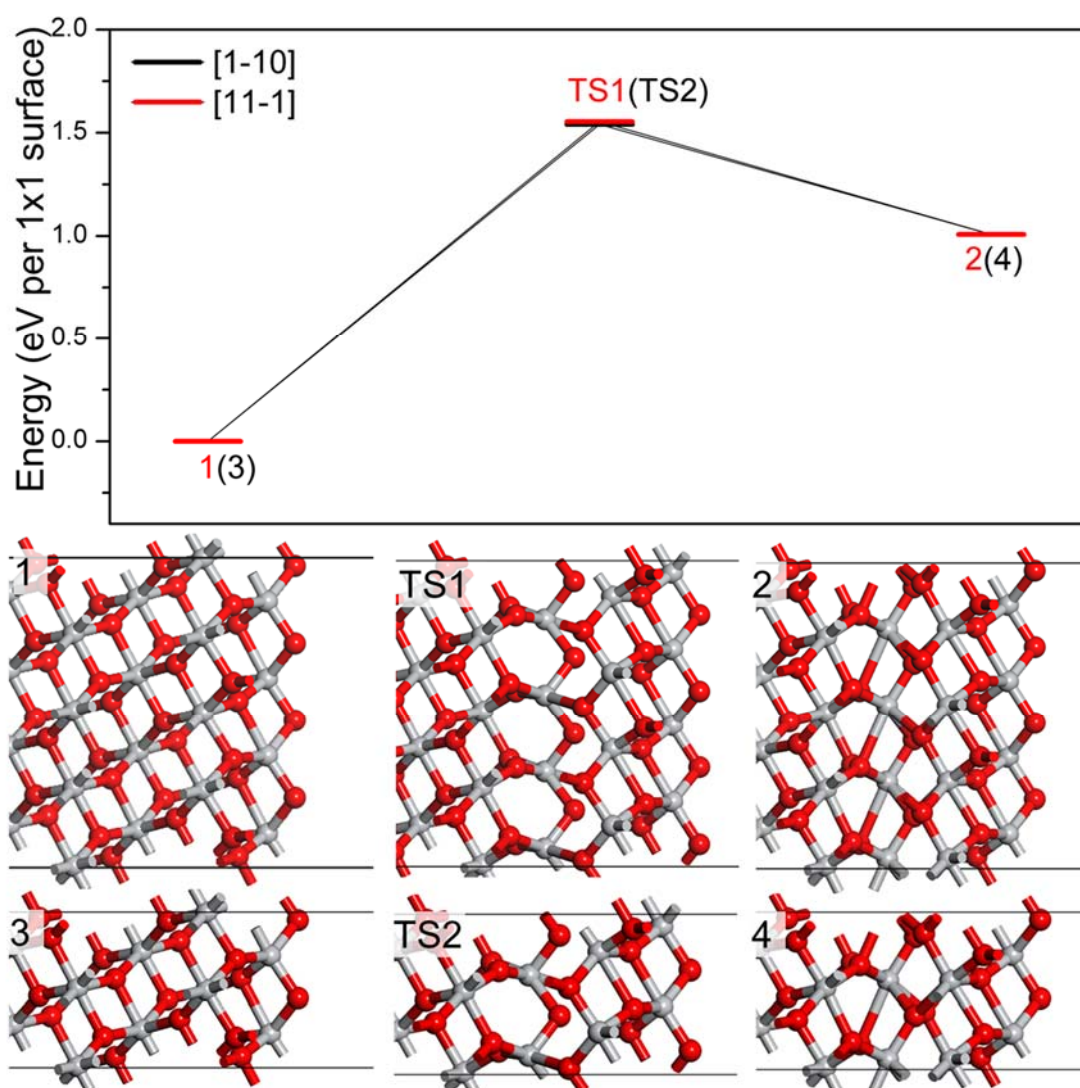


Figure S1. DFT Energy profile for the phase transition from anatase to TiO₂-II in doubled supercells of anatase (112) in bulk anatase lattice. Red curve: SC-1 with doubled supercell at the [11 $\bar{1}$] direction; Black curve: SC-2 with doubled supercell at the [1 $\bar{1}$ 0] direction. The color scheme of atoms is the same as Figure 2.

Figure S1 shows that the reaction barrier is identical for the phase transition along two

directions when the bulk anatase lattice is utilized. This is different from Figure 4 in main text, where a compressive strain is present.

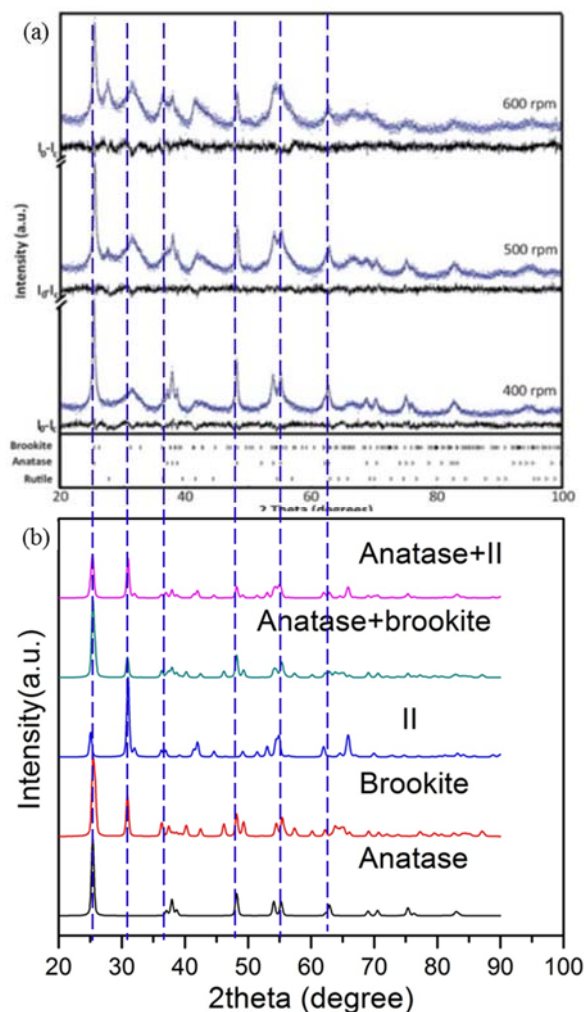


Figure S2. (a) XRD from ref 1 in high energy ball milling experiment (b) The simulated XRD of anatase, brookite, TiO_2 -II, anatase+ TiO_2 -II, anatase+brookite. We show that it is difficult to distinguish the intermediate phase in anatase-rutile phase transition using XRD alone. The simulated XRD pattern for TiO_2 -II + anatase and for brookite + anatase are nearly identical.

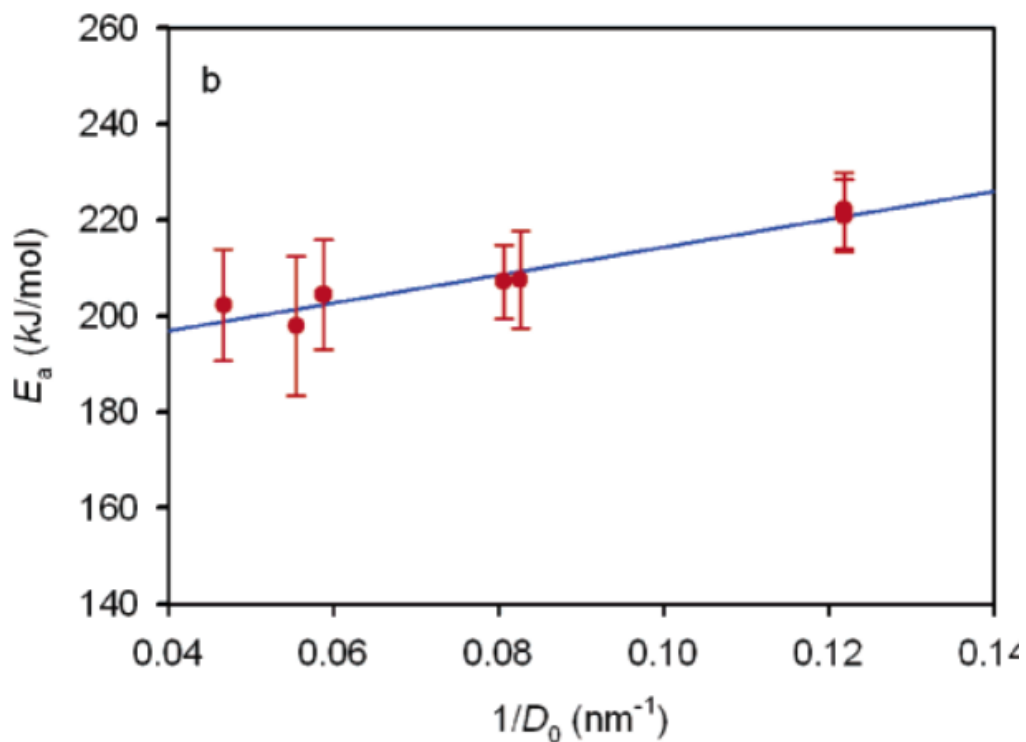


Figure S3. The relation of particle size and the phase transition barrier adapted from ref 2.

- (1) Rezaee M., Mousavi Khoie S.M., Liu K.H., *CrystEngComm* 13 (2011): 5055.
- (2) Zhang H.Z., Banfield J.F., *Chem. Mater.* 17 (2005): 3421-3425.

XYZ coordinates in .arc format

1. unreconstructed anatase (112) (state 1 in Figure 3)

```

PBC      5.4749    5.5803    47.1748    90.0000    90.0000    90.0000
O         5.425839615    1.263830095    23.572119725 CORE    1 O O    0.0000    1
O         2.694980214    2.581323101    25.863430228 CORE    2 O O    0.0000    2
O         5.432122237    3.899403108    28.168554750 CORE    3 O O    0.0000    3
O         2.694561131    5.242877243    30.485949389 CORE    4 O O    0.0000    4
O         0.016864601    1.088800692    32.940312361 CORE    5 O O    0.0000    5
O         2.885455407    2.496893639    35.179271473 CORE    6 O O    0.0000    6

```

O	1.410897253	1.109626959	28.168975651 CORE	7 O O	0.0000	7
O	4.150613077	2.452073845	30.484828392 CORE	8 O O	0.0000	8
O	1.348911367	3.879255108	32.943774162 CORE	9 O O	0.0000	9
O	3.958599695	5.287227541	35.178184684 CORE	10 O O	0.0000	10
O	1.415972091	4.053917085	23.572844390 CORE	11 O O	0.0000	11
O	4.149195917	5.370576573	25.861945272 CORE	12 O O	0.0000	12
O	4.134975283	0.388623817	28.590021485 CORE	13 O O	0.0000	13
O	1.374387077	1.743280581	30.911755976 CORE	14 O O	0.0000	14
O	4.150379891	3.202337265	33.125576605 CORE	15 O O	0.0000	15
O	1.433380281	2.023530185	21.754127698 CORE	16 O O	0.0000	16
O	4.141428993	3.322249959	24.005286580 CORE	17 O O	0.0000	17
O	1.400572053	4.635596922	26.292530157 CORE	18 O O	0.0000	18
O	2.699452108	0.532858401	24.007619891 CORE	19 O O	0.0000	19
O	5.442694565	1.845612444	26.291971694 CORE	20 O O	0.0000	20
O	2.708490073	3.179185258	28.591016620 CORE	21 O O	0.0000	21
O	5.473930863	4.531709843	30.909529381 CORE	22 O O	0.0000	22
O	5.410383482	4.813694893	21.753593832 CORE	23 O O	0.0000	23
O	2.691326155	0.411745364	33.126247007 CORE	24 O O	0.0000	24
O	2.679787540	5.514444486	21.282277575 CORE	25 O O	0.0000	25
O	4.164510520	2.724014954	21.280620661 CORE	26 O O	0.0000	26
O	4.094408619	0.671530727	19.401979644 CORE	27 O O	0.0000	27
O	2.748504510	3.462024697	19.402320975 CORE	28 O O	0.0000	28
Ti	0.041078670	3.026391695	22.654182610 CORE	29 Ti Ti	0.0000	29
Ti	2.783582421	4.337289515	24.935459447 CORE	30 Ti Ti	0.0000	30
Ti	0.056800890	0.064732552	27.232048224 CORE	31 Ti Ti	0.0000	31
Ti	2.820370893	1.373231737	29.542012315 CORE	32 Ti Ti	0.0000	32
Ti	0.128387696	2.778252368	31.885631650 CORE	33 Ti Ti	0.0000	33
Ti	2.967354614	4.015265832	34.173771156 CORE	34 Ti Ti	0.0000	34
Ti	1.326616257	0.236431821	22.654423676 CORE	35 Ti Ti	0.0000	35
Ti	4.058586023	1.547431040	24.935631267 CORE	36 Ti Ti	0.0000	36
Ti	1.311365284	2.854446119	27.233023853 CORE	37 Ti Ti	0.0000	37
Ti	4.024204568	4.162920978	29.542124564 CORE	38 Ti Ti	0.0000	38
Ti	1.241311998	5.568577393	31.885456758 CORE	39 Ti Ti	0.0000	39
Ti	3.875580170	1.225564770	34.174353819 CORE	40 Ti Ti	0.0000	40
Ti	2.765462305	1.698145370	20.378334144 CORE	41 Ti Ti	0.0000	41
Ti	4.077998169	4.488405726	20.378063921 CORE	42 Ti Ti	0.0000	42
O	2.669489966	0.385907000	2.512823998 CORE	43 O O	0.0000	43
O	0.012247000	1.806836000	4.780557996 CORE	44 O O	0.0000	44
O	2.731408965	3.108716000	7.157657994 CORE	45 O O	0.0000	45
O	0.013680000	4.461563000	9.542228992 CORE	46 O O	0.0000	46
O	2.740277965	0.208281000	11.930501990 CORE	47 O O	0.0000	47
O	5.471556100	1.568399000	14.303808988 CORE	48 O O	0.0000	48
O	4.112225948	0.318550000	7.157657994 CORE	49 O O	0.0000	49
O	1.355046983	1.671398000	9.542228992 CORE	50 O O	0.0000	50

O	4.103355948	2.998447000	11.930501990 CORE	51	O	O	0.0000	51
O	1.372077983	4.358565000	14.303808988 CORE	52	O	O	0.0000	52
O	4.174143947	3.176073000	2.512823998 CORE	53	O	O	0.0000	53
O	1.356479983	4.597002000	4.780558996 CORE	54	O	O	0.0000	54
O	4.095349948	0.906552000	9.961921992 CORE	55	O	O	0.0000	55
O	1.366850983	2.263596000	12.336128990 CORE	56	O	O	0.0000	56
O	4.001488949	1.084165000	0.506720000 CORE	57	O	O	0.0000	57
O	1.366244983	2.490754000	2.768651998 CORE	58	O	O	0.0000	58
O	4.094195948	3.825713000	5.200810996 CORE	59	O	O	0.0000	59
O	1.371565983	5.165037000	7.579951994 CORE	60	O	O	0.0000	60
O	2.749437965	1.035547000	5.200810996 CORE	61	O	O	0.0000	61
O	5.472068100	2.374871000	7.579951994 CORE	62	O	O	0.0000	62
O	2.748283965	3.696718000	9.961921992 CORE	63	O	O	0.0000	63
O	0.001875000	5.053761000	12.336128990 CORE	64	O	O	0.0000	64
O	2.842144964	3.874331000	0.506720000 CORE	65	O	O	0.0000	65
O	0.002482000	5.280919000	2.768651998 CORE	66	O	O	0.0000	66
O	2.737453965	2.892390000	16.698125986 CORE	67	O	O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235259000	19.083572984 CORE	68	O	O	0.0000	68
O	4.106179948	0.102224000	16.698125986 CORE	69	O	O	0.0000	69
O	1.368726983	1.445093000	19.083572984 CORE	70	O	O	0.0000	70
O	4.106179948	3.627793000	14.713434988 CORE	71	O	O	0.0000	71
O	1.368726983	4.970662000	17.098880986 CORE	72	O	O	0.0000	72
O	2.737453965	0.837628000	14.713434988 CORE	73	O	O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180496000	17.098880986 CORE	74	O	O	0.0000	74
Ti	2.974929962	2.347366000	1.498959999 CORE	75	Ti	Ti	0.0000	75
Ti	0.126369998	3.554143000	3.803964997 CORE	76	Ti	Ti	0.0000	76
Ti	2.814535964	4.907998000	6.181838995 CORE	77	Ti	Ti	0.0000	77
Ti	0.045219999	0.638905000	8.558601993 CORE	78	Ti	Ti	0.0000	78
Ti	2.759544965	1.978347000	10.944570991 CORE	79	Ti	Ti	0.0000	79
Ti	0.005683000	3.317790000	13.321458989 CORE	80	Ti	Ti	0.0000	80
Ti	1.242356984	0.763977000	3.803964997 CORE	81	Ti	Ti	0.0000	81
Ti	4.029097949	2.117832000	6.181838995 CORE	82	Ti	Ti	0.0000	82
Ti	1.323505983	3.429071000	8.558601993 CORE	83	Ti	Ti	0.0000	83
Ti	4.084088948	4.768513000	10.944570991 CORE	84	Ti	Ti	0.0000	84
Ti	3.868703951	5.137532000	1.498959999 CORE	85	Ti	Ti	0.0000	85
Ti	1.363042983	0.527624000	13.321458989 CORE	86	Ti	Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417712000	18.091226985 CORE	87	Ti	Ti	0.0000	87
Ti	2.737453965	4.655174000	15.705780987 CORE	88	Ti	Ti	0.0000	88
Ti	4.106179948	1.865009000	15.705780987 CORE	89	Ti	Ti	0.0000	89
Ti	1.368726983	3.207877000	18.091226985 CORE	90	Ti	Ti	0.0000	90

end

end

- anatase (112) with subsurface two layers TiO₂-II structure (state 3 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000			
O	5.443610663	1.246066681	23.687335696	CORE	1	O	O	0.0000	1
O	2.790255038	2.564555535	26.076825713	CORE	2	O	O	0.0000	2
O	5.407796710	3.775944911	28.373643508	CORE	3	O	O	0.0000	3
O	4.086422443	4.690519732	30.628856244	CORE	4	O	O	0.0000	4
O	0.159551513	4.059918586	33.067222306	CORE	5	O	O	0.0000	5
O	2.904481843	5.304252445	35.068818631	CORE	6	O	O	0.0000	6
O	1.436699071	0.986786219	28.372412216	CORE	7	O	O	0.0000	7
O	2.758327748	1.899613627	30.629222229	CORE	8	O	O	0.0000	8
O	1.214104493	1.269329819	33.064556939	CORE	9	O	O	0.0000	9
O	3.937353587	2.514974953	35.069874545	CORE	10	O	O	0.0000	10
O	1.398227335	4.036052868	23.687335974	CORE	11	O	O	0.0000	11
O	4.053346443	5.354795110	26.076429687	CORE	12	O	O	0.0000	12
O	4.183629009	0.900211691	28.655324064	CORE	13	O	O	0.0000	13
O	1.362602652	4.826979920	30.937304543	CORE	14	O	O	0.0000	14
O	4.010797391	0.436327056	32.937910610	CORE	15	O	O	0.0000	15
O	1.394746534	2.002465135	21.808538469	CORE	16	O	O	0.0000	16
O	4.125767130	3.299880894	24.134650016	CORE	17	O	O	0.0000	17
O	1.293211124	4.533524542	26.405086572	CORE	18	O	O	0.0000	18
O	2.715371117	0.509604973	24.135501184	CORE	19	O	O	0.0000	19
O	0.075552320	1.743488436	26.404210991	CORE	20	O	O	0.0000	20
O	2.661722490	3.688263873	28.656772781	CORE	21	O	O	0.0000	21
O	0.004891177	2.038841643	30.939732452	CORE	22	O	O	0.0000	22
O	5.447560183	4.792530411	21.808480208	CORE	23	O	O	0.0000	23
O	2.839886747	3.227338821	32.934426440	CORE	24	O	O	0.0000	24
O	2.715844951	5.531099227	21.370713923	CORE	25	O	O	0.0000	25
O	4.126858642	2.740454989	21.369968315	CORE	26	O	O	0.0000	26
O	4.099702323	0.679294958	19.449099824	CORE	27	O	O	0.0000	27
O	2.741982937	3.470331601	19.450284902	CORE	28	O	O	0.0000	28
Ti	0.013660521	3.018357146	22.751829657	CORE	29	Ti	Ti	0.0000	29
Ti	2.752609214	4.305714880	25.082535513	CORE	30	Ti	Ti	0.0000	30
Ti	5.464159200	0.101915622	27.423034227	CORE	31	Ti	Ti	0.0000	31
Ti	2.759400973	0.360546413	29.660143810	CORE	32	Ti	Ti	0.0000	32
Ti	0.117468564	0.371167314	31.880471170	CORE	33	Ti	Ti	0.0000	33
Ti	2.918006660	1.267028355	34.086957049	CORE	34	Ti	Ti	0.0000	34
Ti	1.352633547	0.228429900	22.751921091	CORE	35	Ti	Ti	0.0000	35
Ti	4.089287738	1.515306570	25.083782948	CORE	36	Ti	Ti	0.0000	36
Ti	1.381232241	2.891253256	27.425881887	CORE	37	Ti	Ti	0.0000	37
Ti	4.086735669	3.151481258	29.661574777	CORE	38	Ti	Ti	0.0000	38
Ti	1.253696454	3.162347108	31.882234886	CORE	39	Ti	Ti	0.0000	39
Ti	3.928011090	4.056960925	34.086999777	CORE	40	Ti	Ti	0.0000	40
Ti	2.747672031	1.715183347	20.426538999	CORE	41	Ti	Ti	0.0000	41
Ti	4.094908217	4.505897377	20.425832851	CORE	42	Ti	Ti	0.0000	42

O	2.669489966	0.385907000	2.512823998 CORE	43	O	O	0.0000	43
O	0.012247000	1.806836000	4.780557996 CORE	44	O	O	0.0000	44
O	2.731408965	3.108716000	7.157657994 CORE	45	O	O	0.0000	45
O	0.013680000	4.461563000	9.542228992 CORE	46	O	O	0.0000	46
O	2.740277965	0.208281000	11.930501990 CORE	47	O	O	0.0000	47
O	5.471556100	1.568399000	14.303808988 CORE	48	O	O	0.0000	48
O	4.112225948	0.318550000	7.157657994 CORE	49	O	O	0.0000	49
O	1.355046983	1.671398000	9.542228992 CORE	50	O	O	0.0000	50
O	4.103355948	2.998447000	11.930501990 CORE	51	O	O	0.0000	51
O	1.372077983	4.358565000	14.303808988 CORE	52	O	O	0.0000	52
O	4.174143947	3.176073000	2.512823998 CORE	53	O	O	0.0000	53
O	1.356479983	4.597002000	4.780558996 CORE	54	O	O	0.0000	54
O	4.095349948	0.906552000	9.961921992 CORE	55	O	O	0.0000	55
O	1.366850983	2.263596000	12.336128990 CORE	56	O	O	0.0000	56
O	4.001488949	1.084165000	0.506720000 CORE	57	O	O	0.0000	57
O	1.366244983	2.490754000	2.768651998 CORE	58	O	O	0.0000	58
O	4.094195948	3.825713000	5.200810996 CORE	59	O	O	0.0000	59
O	1.371565983	5.165037000	7.579951994 CORE	60	O	O	0.0000	60
O	2.749437965	1.035547000	5.200810996 CORE	61	O	O	0.0000	61
O	5.472068100	2.374871000	7.579951994 CORE	62	O	O	0.0000	62
O	2.748283965	3.696718000	9.961921992 CORE	63	O	O	0.0000	63
O	0.001875000	5.053761000	12.336128990 CORE	64	O	O	0.0000	64
O	2.842144964	3.874331000	0.506720000 CORE	65	O	O	0.0000	65
O	0.002482000	5.280919000	2.768651998 CORE	66	O	O	0.0000	66
O	2.737453965	2.892390000	16.698125986 CORE	67	O	O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235259000	19.083572984 CORE	68	O	O	0.0000	68
O	4.106179948	0.102224000	16.698125986 CORE	69	O	O	0.0000	69
O	1.368726983	1.445093000	19.083572984 CORE	70	O	O	0.0000	70
O	4.106179948	3.627793000	14.713434988 CORE	71	O	O	0.0000	71
O	1.368726983	4.970662000	17.098880986 CORE	72	O	O	0.0000	72
O	2.737453965	0.837628000	14.713434988 CORE	73	O	O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180496000	17.098880986 CORE	74	O	O	0.0000	74
Ti	2.974929962	2.347366000	1.498959999 CORE	75	Ti	Ti	0.0000	75
Ti	0.126369998	3.554143000	3.803964997 CORE	76	Ti	Ti	0.0000	76
Ti	2.814535964	4.907998000	6.181838995 CORE	77	Ti	Ti	0.0000	77
Ti	0.045219999	0.638905000	8.558601993 CORE	78	Ti	Ti	0.0000	78
Ti	2.759544965	1.978347000	10.944570991 CORE	79	Ti	Ti	0.0000	79
Ti	0.005683000	3.317790000	13.321458989 CORE	80	Ti	Ti	0.0000	80
Ti	1.242356984	0.763977000	3.803964997 CORE	81	Ti	Ti	0.0000	81
Ti	4.029097949	2.117832000	6.181838995 CORE	82	Ti	Ti	0.0000	82
Ti	1.323505983	3.429071000	8.558601993 CORE	83	Ti	Ti	0.0000	83
Ti	4.084088948	4.768513000	10.944570991 CORE	84	Ti	Ti	0.0000	84
Ti	3.868703951	5.137532000	1.498959999 CORE	85	Ti	Ti	0.0000	85
Ti	1.363042983	0.527624000	13.321458989 CORE	86	Ti	Ti	0.0000	86

Ti	0.000000000	0.417712000	18.091226985 CORE	87 Ti Ti	0.0000	87
Ti	2.737453965	4.655174000	15.705780987 CORE	88 Ti Ti	0.0000	88
Ti	4.106179948	1.865009000	15.705780987 CORE	89 Ti Ti	0.0000	89
Ti	1.368726983	3.207877000	18.091226985 CORE	90 Ti Ti	0.0000	90

end
end

3. unreconstructed anatase (112) (state 1 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000		
O	5.454727392	1.311239123	23.681566541 CORE	1 O O	0.0000	1		
O	2.705982801	2.625023975	26.004507606 CORE	2 O O	0.0000	2		
O	5.468364600	3.972647215	28.353262824 CORE	3 O O	0.0000	3		
O	2.719197663	5.285547368	30.675495952 CORE	4 O O	0.0000	4		
O	5.511925808	1.096628096	33.155352667 CORE	5 O O	0.0000	5		
O	2.861257965	2.470348110	35.351602556 CORE	6 O O	0.0000	6		
O	1.362509638	1.183071327	28.353209854 CORE	7 O O	0.0000	7		
O	4.102047912	2.497552311	30.681985369 CORE	8 O O	0.0000	8		
O	1.325368183	3.887238022	33.150690595 CORE	9 O O	0.0000	9		
O	3.964395430	5.262224306	35.354161815 CORE	10 O O	0.0000	10		
O	1.384881095	4.101640587	23.682146011 CORE	11 O O	0.0000	11		
O	4.132044000	5.414749726	26.004699256 CORE	12 O O	0.0000	12		
O	4.098471636	0.422426025	28.747943949 CORE	13 O O	0.0000	13		
O	1.336366792	1.756254538	31.101166166 CORE	14 O O	0.0000	14		
O	4.123611456	3.178976683	33.308829992 CORE	15 O O	0.0000	15		
O	1.405741582	2.039476537	21.794649141 CORE	16 O O	0.0000	16		
O	4.116107497	3.351591288	24.095494180 CORE	17 O O	0.0000	17		
O	1.386435087	4.694198102	26.425576509 CORE	18 O O	0.0000	18		
O	2.723089792	0.561564395	24.095974613 CORE	19 O O	0.0000	19		
O	5.450341905	1.903734594	26.424330818 CORE	20 O O	0.0000	20		
O	2.733042711	3.211808898	28.745028504 CORE	21 O O	0.0000	21		
O	5.487543346	4.548030894	31.103863792 CORE	22 O O	0.0000	22		
O	5.436403836	4.829437191	21.794074940 CORE	23 O O	0.0000	23		
O	2.719697554	0.390660881	33.297092494 CORE	24 O O	0.0000	24		
O	2.701224625	5.538262248	21.353315430 CORE	25 O O	0.0000	25		
O	4.141625415	2.747670905	21.352658626 CORE	26 O O	0.0000	26		
O	4.091595499	0.679553588	19.432345585 CORE	27 O O	0.0000	27		
O	2.750167192	3.470568594	19.433546773 CORE	28 O O	0.0000	28		
Ti	0.023831480	3.057941855	22.733598363 CORE	29 Ti Ti	0.0000	29		
Ti	2.764370522	4.383236365	25.054658132 CORE	30 Ti Ti	0.0000	30		
Ti	0.036948922	0.116540659	27.383725040 CORE	31 Ti Ti	0.0000	31		
Ti	2.803534343	1.417449481	29.719206289 CORE	32 Ti Ti	0.0000	32		
Ti	0.109094229	2.834851342	32.080681620 CORE	33 Ti Ti	0.0000	33		
Ti	2.942049282	3.998695108	34.362066056 CORE	34 Ti Ti	0.0000	34		

Ti	1.342648673	0.268226117	22.733466793 CORE	35 Ti Ti	0.0000	35
Ti	4.074961200	1.594353202	25.054259492 CORE	36 Ti Ti	0.0000	36
Ti	1.322995915	2.908367623	27.381883058 CORE	37 Ti Ti	0.0000	37
Ti	4.024263255	4.209329581	29.719439893 CORE	38 Ti Ti	0.0000	38
Ti	1.245888230	0.043619904	32.084977912 CORE	39 Ti Ti	0.0000	39
Ti	3.890035737	1.207900734	34.361786111 CORE	40 Ti Ti	0.0000	40
Ti	2.753943285	1.718183143	20.415393713 CORE	41 Ti Ti	0.0000	41
Ti	4.088674877	4.508714810	20.414405756 CORE	42 Ti Ti	0.0000	42
O	2.669489966	0.385907000	2.512823998 CORE	43 O O	0.0000	43
O	0.012247000	1.806836000	4.780557996 CORE	44 O O	0.0000	44
O	2.731408965	3.108716000	7.157657994 CORE	45 O O	0.0000	45
O	0.013680000	4.461563000	9.542228992 CORE	46 O O	0.0000	46
O	2.740277965	0.208281000	11.930501990 CORE	47 O O	0.0000	47
O	5.471556100	1.568399000	14.303808988 CORE	48 O O	0.0000	48
O	4.112225948	0.318550000	7.157657994 CORE	49 O O	0.0000	49
O	1.355046983	1.671398000	9.542228992 CORE	50 O O	0.0000	50
O	4.103355948	2.998447000	11.930501990 CORE	51 O O	0.0000	51
O	1.372077983	4.358565000	14.303808988 CORE	52 O O	0.0000	52
O	4.174143947	3.176073000	2.512823998 CORE	53 O O	0.0000	53
O	1.356479983	4.597002000	4.780558996 CORE	54 O O	0.0000	54
O	4.095349948	0.906552000	9.961921992 CORE	55 O O	0.0000	55
O	1.366850983	2.263596000	12.336128990 CORE	56 O O	0.0000	56
O	4.001488949	1.084165000	0.506720000 CORE	57 O O	0.0000	57
O	1.366244983	2.490754000	2.768651998 CORE	58 O O	0.0000	58
O	4.094195948	3.825713000	5.200810996 CORE	59 O O	0.0000	59
O	1.371565983	5.165037000	7.579951994 CORE	60 O O	0.0000	60
O	2.749437965	1.035547000	5.200810996 CORE	61 O O	0.0000	61
O	5.472068100	2.374871000	7.579951994 CORE	62 O O	0.0000	62
O	2.748283965	3.696718000	9.961921992 CORE	63 O O	0.0000	63
O	0.001875000	5.053761000	12.336128990 CORE	64 O O	0.0000	64
O	2.842144964	3.874331000	0.506720000 CORE	65 O O	0.0000	65
O	0.002482000	5.280919000	2.768651998 CORE	66 O O	0.0000	66
O	2.737453965	2.892390000	16.698125986 CORE	67 O O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235259000	19.083572984 CORE	68 O O	0.0000	68
O	4.106179948	0.102224000	16.698125986 CORE	69 O O	0.0000	69
O	1.368726983	1.445093000	19.083572984 CORE	70 O O	0.0000	70
O	4.106179948	3.627793000	14.713434988 CORE	71 O O	0.0000	71
O	1.368726983	4.970662000	17.098880986 CORE	72 O O	0.0000	72
O	2.737453965	0.837628000	14.713434988 CORE	73 O O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180496000	17.098880986 CORE	74 O O	0.0000	74
Ti	2.974929962	2.347366000	1.498959999 CORE	75 Ti Ti	0.0000	75
Ti	0.126369998	3.554143000	3.803964997 CORE	76 Ti Ti	0.0000	76
Ti	2.814535964	4.907998000	6.181838995 CORE	77 Ti Ti	0.0000	77
Ti	0.045219999	0.638905000	8.558601993 CORE	78 Ti Ti	0.0000	78

Ti	2.759544965	1.978347000	10.944570991 CORE	79 Ti Ti	0.0000	79
Ti	0.005683000	3.317790000	13.321458989 CORE	80 Ti Ti	0.0000	80
Ti	1.242356984	0.763977000	3.803964997 CORE	81 Ti Ti	0.0000	81
Ti	4.029097949	2.117832000	6.181838995 CORE	82 Ti Ti	0.0000	82
Ti	1.323505983	3.429071000	8.558601993 CORE	83 Ti Ti	0.0000	83
Ti	4.084088948	4.768513000	10.944570991 CORE	84 Ti Ti	0.0000	84
Ti	3.868703951	5.137532000	1.498959999 CORE	85 Ti Ti	0.0000	85
Ti	1.363042983	0.527624000	13.321458989 CORE	86 Ti Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417712000	18.091226985 CORE	87 Ti Ti	0.0000	87
Ti	2.737453965	4.655174000	15.705780987 CORE	88 Ti Ti	0.0000	88
Ti	4.106179948	1.865009000	15.705780987 CORE	89 Ti Ti	0.0000	89
Ti	1.368726983	3.207877000	18.091226985 CORE	90 Ti Ti	0.0000	90

end
end

4. anatase (112) with one top layer TiO₂-II structure (state 2 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000		
O	5.451196094	1.263111184	23.691935112 CORE	1 O O	0.0000	1		
O	2.723189418	2.572436952	26.026078356 CORE	2 O O	0.0000	2		
O	5.462116767	3.857115304	28.353687643 CORE	3 O O	0.0000	3		
O	2.788282465	5.185589401	30.769006058 CORE	4 O O	0.0000	4		
O	5.410160508	0.879250155	33.019510047 CORE	5 O O	0.0000	5		
O	3.927210902	1.698929070	35.274540743 CORE	6 O O	0.0000	6		
O	1.399043527	1.064209257	28.342712476 CORE	7 O O	0.0000	7		
O	4.072358097	2.394816456	30.772886163 CORE	8 O O	0.0000	8		
O	1.477686583	3.672183117	33.020783226 CORE	9 O O	0.0000	9		
O	2.993380071	4.485032978	35.284829831 CORE	10 O O	0.0000	10		
O	1.383352053	4.053295926	23.691182880 CORE	11 O O	0.0000	11		
O	4.109355473	5.362941321	26.028193170 CORE	12 O O	0.0000	12		
O	4.117628852	0.311411092	28.800391049 CORE	13 O O	0.0000	13		
O	1.305024333	1.611881890	31.023823622 CORE	14 O O	0.0000	14		
O	4.301329688	3.660071706	33.270055789 CORE	15 O O	0.0000	15		
O	1.395225268	2.010578580	21.805489176 CORE	16 O O	0.0000	16		
O	4.114711105	3.306416185	24.114868019 CORE	17 O O	0.0000	17		
O	1.359531132	4.592191140	26.434706621 CORE	18 O O	0.0000	18		
O	2.718274079	0.516769085	24.115987625 CORE	19 O O	0.0000	19		
O	5.471842433	1.804455371	26.441813659 CORE	20 O O	0.0000	20		
O	2.745809055	3.099906952	28.797726072 CORE	21 O O	0.0000	21		
O	5.559700786	4.399036538	31.031039303 CORE	22 O O	0.0000	22		
O	5.443464747	4.801200245	21.805798085 CORE	23 O O	0.0000	23		
O	2.578716674	0.866061981	33.281246948 CORE	24 O O	0.0000	24		
O	2.711235313	5.529866650	21.368390709 CORE	25 O O	0.0000	25		
O	4.129614679	2.739545111	21.367027099 CORE	26 O O	0.0000	26		

O	4.096148400	0.676692009	19.446461992 CORE	27	O	O	0.0000	27
O	2.744379097	3.467968829	19.447651841 CORE	28	O	O	0.0000	28
Ti	0.008168122	3.027519573	22.745838926 CORE	29	Ti	Ti	0.0000	29
Ti	2.744962252	4.321639955	25.071159434 CORE	30	Ti	Ti	0.0000	30
Ti	0.020168926	0.031622465	27.402032442 CORE	31	Ti	Ti	0.0000	31
Ti	2.767246467	1.353503570	29.750549210 CORE	32	Ti	Ti	0.0000	32
Ti	0.068854308	2.607712732	32.060388413 CORE	33	Ti	Ti	0.0000	33
Ti	2.979651404	3.012593424	34.261561620 CORE	34	Ti	Ti	0.0000	34
Ti	1.353473917	0.238557488	22.744332165 CORE	35	Ti	Ti	0.0000	35
Ti	4.088605079	1.531859083	25.071555808 CORE	36	Ti	Ti	0.0000	36
Ti	1.347943717	2.818649015	27.407534941 CORE	37	Ti	Ti	0.0000	37
Ti	4.092987067	4.140341101	29.760068365 CORE	38	Ti	Ti	0.0000	38
Ti	1.334680825	-0.188189874	32.075349832 CORE	39	Ti	Ti	0.0000	39
Ti	3.917190012	0.221467170	34.255020621 CORE	40	Ti	Ti	0.0000	40
Ti	2.746090622	1.714910517	20.424248041 CORE	41	Ti	Ti	0.0000	41
Ti	4.095248250	4.506146296	20.421568923 CORE	42	Ti	Ti	0.0000	42
O	2.669489966	0.385907000	2.512823998 CORE	43	O	O	0.0000	43
O	0.012247000	1.806836000	4.780557996 CORE	44	O	O	0.0000	44
O	2.731408965	3.108716000	7.157657994 CORE	45	O	O	0.0000	45
O	0.013680000	4.461563000	9.542228992 CORE	46	O	O	0.0000	46
O	2.740277965	0.208281000	11.930501990 CORE	47	O	O	0.0000	47
O	5.471556100	1.568399000	14.303808988 CORE	48	O	O	0.0000	48
O	4.112225948	0.318550000	7.157657994 CORE	49	O	O	0.0000	49
O	1.355046983	1.671398000	9.542228992 CORE	50	O	O	0.0000	50
O	4.103355948	2.998447000	11.930501990 CORE	51	O	O	0.0000	51
O	1.372077983	4.358565000	14.303808988 CORE	52	O	O	0.0000	52
O	4.174143947	3.176073000	2.512823998 CORE	53	O	O	0.0000	53
O	1.356479983	4.597002000	4.780558996 CORE	54	O	O	0.0000	54
O	4.095349948	0.906552000	9.961921992 CORE	55	O	O	0.0000	55
O	1.366850983	2.263596000	12.336128990 CORE	56	O	O	0.0000	56
O	4.001488949	1.084165000	0.506720000 CORE	57	O	O	0.0000	57
O	1.366244983	2.490754000	2.768651998 CORE	58	O	O	0.0000	58
O	4.094195948	3.825713000	5.200810996 CORE	59	O	O	0.0000	59
O	1.371565983	5.165037000	7.579951994 CORE	60	O	O	0.0000	60
O	2.749437965	1.035547000	5.200810996 CORE	61	O	O	0.0000	61
O	5.472068100	2.374871000	7.579951994 CORE	62	O	O	0.0000	62
O	2.748283965	3.696718000	9.961921992 CORE	63	O	O	0.0000	63
O	0.001875000	5.053761000	12.336128990 CORE	64	O	O	0.0000	64
O	2.842144964	3.874331000	0.506720000 CORE	65	O	O	0.0000	65
O	0.002482000	5.280919000	2.768651998 CORE	66	O	O	0.0000	66
O	2.737453965	2.892390000	16.698125986 CORE	67	O	O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235259000	19.083572984 CORE	68	O	O	0.0000	68
O	4.106179948	0.102224000	16.698125986 CORE	69	O	O	0.0000	69
O	1.368726983	1.445093000	19.083572984 CORE	70	O	O	0.0000	70

O	4.106179948	3.627793000	14.713434988	CORE	71	O	O	0.0000	71
O	1.368726983	4.970662000	17.098880986	CORE	72	O	O	0.0000	72
O	2.737453965	0.837628000	14.713434988	CORE	73	O	O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180496000	17.098880986	CORE	74	O	O	0.0000	74
Ti	2.974929962	2.347366000	1.498959999	CORE	75	Ti	Ti	0.0000	75
Ti	0.126369998	3.554143000	3.803964997	CORE	76	Ti	Ti	0.0000	76
Ti	2.814535964	4.907998000	6.181838995	CORE	77	Ti	Ti	0.0000	77
Ti	0.045219999	0.638905000	8.558601993	CORE	78	Ti	Ti	0.0000	78
Ti	2.759544965	1.978347000	10.944570991	CORE	79	Ti	Ti	0.0000	79
Ti	0.005683000	3.317790000	13.321458989	CORE	80	Ti	Ti	0.0000	80
Ti	1.242356984	0.763977000	3.803964997	CORE	81	Ti	Ti	0.0000	81
Ti	4.029097949	2.117832000	6.181838995	CORE	82	Ti	Ti	0.0000	82
Ti	1.323505983	3.429071000	8.558601993	CORE	83	Ti	Ti	0.0000	83
Ti	4.084088948	4.768513000	10.944570991	CORE	84	Ti	Ti	0.0000	84
Ti	3.868703951	5.137532000	1.498959999	CORE	85	Ti	Ti	0.0000	85
Ti	1.363042983	0.527624000	13.321458989	CORE	86	Ti	Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417712000	18.091226985	CORE	87	Ti	Ti	0.0000	87
Ti	2.737453965	4.655174000	15.705780987	CORE	88	Ti	Ti	0.0000	88
Ti	4.106179948	1.865009000	15.705780987	CORE	89	Ti	Ti	0.0000	89
Ti	1.368726983	3.207877000	18.091226985	CORE	90	Ti	Ti	0.0000	90

end
end

5. anatase (112) with one top layer TiO₂-II structure (state 2 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000			
O	5.437502992	1.266391055	23.641664520	CORE	1	O	O	0.0000	1
O	2.696602410	2.590598924	25.946293208	CORE	2	O	O	0.0000	2
O	5.390579007	3.901891226	28.232549521	CORE	3	O	O	0.0000	3
O	2.705247733	5.281660479	30.638300848	CORE	4	O	O	0.0000	4
O	5.260504206	0.943578654	32.838021018	CORE	5	O	O	0.0000	5
O	3.819311775	1.753427035	35.136318621	CORE	6	O	O	0.0000	6
O	1.377404130	1.109821478	28.231797924	CORE	7	O	O	0.0000	7
O	3.959981758	2.500139734	30.658242280	CORE	8	O	O	0.0000	8
O	1.404505619	3.737358906	32.838947683	CORE	9	O	O	0.0000	9
O	4.233469836	3.748838615	33.152808181	CORE	10	O	O	0.0000	10
O	1.396633465	4.054828336	23.641862679	CORE	11	O	O	0.0000	11
O	4.113476817	5.381090249	25.949754457	CORE	12	O	O	0.0000	12
O	4.078689572	0.404660353	28.689193315	CORE	13	O	O	0.0000	13
O	1.189558392	1.683963347	30.863685867	CORE	14	O	O	0.0000	14
O	2.441053628	0.959861815	33.149749372	CORE	15	O	O	0.0000	15
O	1.408529428	2.015591757	21.779768404	CORE	16	O	O	0.0000	16
O	4.128753312	3.324185052	24.068662829	CORE	17	O	O	0.0000	17
O	1.368020199	4.638844085	26.366670768	CORE	18	O	O	0.0000	18

O	2.702414686	0.531014941	24.065676127 CORE	19	O	O	0.0000	19
O	5.430935977	1.846013147	26.362664547 CORE	20	O	O	0.0000	20
O	2.665395729	3.193960186	28.675192560 CORE	21	O	O	0.0000	21
O	0.000498031	4.475997271	30.868422328 CORE	22	O	O	0.0000	22
O	5.432001846	4.804756297	21.779371243 CORE	23	O	O	0.0000	23
O	2.849256422	4.541162888	35.133305222 CORE	24	O	O	0.0000	24
O	2.700810058	5.524587279	21.333339818 CORE	25	O	O	0.0000	25
O	4.140539041	2.733975155	21.333355514 CORE	26	O	O	0.0000	26
O	4.092540208	0.674446153	19.422631243 CORE	27	O	O	0.0000	27
O	2.750083509	3.464349521	19.422695901 CORE	28	O	O	0.0000	28
Ti	0.029258768	3.027587893	22.705638058 CORE	29	Ti	Ti	0.0000	29
Ti	2.764783992	4.340906514	25.008739252 CORE	30	Ti	Ti	0.0000	30
Ti	0.012913200	0.076601688	27.320440584 CORE	31	Ti	Ti	0.0000	31
Ti	2.704591241	1.421284518	29.649097615 CORE	32	Ti	Ti	0.0000	32
Ti	5.447679988	2.649798884	31.921257664 CORE	33	Ti	Ti	0.0000	33
Ti	2.894497912	3.068804375	34.107099053 CORE	34	Ti	Ti	0.0000	34
Ti	1.336519087	0.239311132	22.705203805 CORE	35	Ti	Ti	0.0000	35
Ti	4.062603681	1.556498893	25.002794663 CORE	36	Ti	Ti	0.0000	36
Ti	1.302456759	2.880080247	27.298091823 CORE	37	Ti	Ti	0.0000	37
Ti	4.003375353	4.230483447	29.605386345 CORE	38	Ti	Ti	0.0000	38
Ti	1.211750189	5.441316678	31.914538245 CORE	39	Ti	Ti	0.0000	39
Ti	3.773457645	0.280242493	34.112287661 CORE	40	Ti	Ti	0.0000	40
Ti	2.757817080	1.704240334	20.401560070 CORE	41	Ti	Ti	0.0000	41
Ti	4.085540526	4.494843289	20.401897676 CORE	42	Ti	Ti	0.0000	42
O	2.669489966	0.385907000	2.512823998 CORE	43	O	O	0.0000	43
O	0.012247000	1.806836000	4.780557996 CORE	44	O	O	0.0000	44
O	2.731408965	3.108716000	7.157657994 CORE	45	O	O	0.0000	45
O	0.013680000	4.461563000	9.542228992 CORE	46	O	O	0.0000	46
O	2.740277965	0.208281000	11.930501990 CORE	47	O	O	0.0000	47
O	5.471556100	1.568399000	14.303808988 CORE	48	O	O	0.0000	48
O	4.112225948	0.318550000	7.157657994 CORE	49	O	O	0.0000	49
O	1.355046983	1.671398000	9.542228992 CORE	50	O	O	0.0000	50
O	4.103355948	2.998447000	11.930501990 CORE	51	O	O	0.0000	51
O	1.372077983	4.358565000	14.303808988 CORE	52	O	O	0.0000	52
O	4.174143947	3.176073000	2.512823998 CORE	53	O	O	0.0000	53
O	1.356479983	4.597002000	4.780558996 CORE	54	O	O	0.0000	54
O	4.095349948	0.906552000	9.961921992 CORE	55	O	O	0.0000	55
O	1.366850983	2.263596000	12.336128990 CORE	56	O	O	0.0000	56
O	4.001488949	1.084165000	0.506720000 CORE	57	O	O	0.0000	57
O	1.366244983	2.490754000	2.768651998 CORE	58	O	O	0.0000	58
O	4.094195948	3.825713000	5.200810996 CORE	59	O	O	0.0000	59
O	1.371565983	5.165037000	7.579951994 CORE	60	O	O	0.0000	60
O	2.749437965	1.035547000	5.200810996 CORE	61	O	O	0.0000	61
O	5.472068100	2.374871000	7.579951994 CORE	62	O	O	0.0000	62

O	2.748283965	3.696718000	9.961921992 CORE	63	O O	0.0000	63
O	0.001875000	5.053761000	12.336128990 CORE	64	O O	0.0000	64
O	2.842144964	3.874331000	0.506720000 CORE	65	O O	0.0000	65
O	0.002482000	5.280919000	2.768651998 CORE	66	O O	0.0000	66
O	2.737453965	2.892390000	16.698125986 CORE	67	O O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235259000	19.083572984 CORE	68	O O	0.0000	68
O	4.106179948	0.102224000	16.698125986 CORE	69	O O	0.0000	69
O	1.368726983	1.445093000	19.083572984 CORE	70	O O	0.0000	70
O	4.106179948	3.627793000	14.713434988 CORE	71	O O	0.0000	71
O	1.368726983	4.970662000	17.098880986 CORE	72	O O	0.0000	72
O	2.737453965	0.837628000	14.713434988 CORE	73	O O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180496000	17.098880986 CORE	74	O O	0.0000	74
Ti	2.974929962	2.347366000	1.498959999 CORE	75	Ti Ti	0.0000	75
Ti	0.126369998	3.554143000	3.803964997 CORE	76	Ti Ti	0.0000	76
Ti	2.814535964	4.907998000	6.181838995 CORE	77	Ti Ti	0.0000	77
Ti	0.045219999	0.638905000	8.558601993 CORE	78	Ti Ti	0.0000	78
Ti	2.759544965	1.978347000	10.944570991 CORE	79	Ti Ti	0.0000	79
Ti	0.005683000	3.317790000	13.321458989 CORE	80	Ti Ti	0.0000	80
Ti	1.242356984	0.763977000	3.803964997 CORE	81	Ti Ti	0.0000	81
Ti	4.029097949	2.117832000	6.181838995 CORE	82	Ti Ti	0.0000	82
Ti	1.323505983	3.429071000	8.558601993 CORE	83	Ti Ti	0.0000	83
Ti	4.084088948	4.768513000	10.944570991 CORE	84	Ti Ti	0.0000	84
Ti	3.868703951	5.137532000	1.498959999 CORE	85	Ti Ti	0.0000	85
Ti	1.363042983	0.527624000	13.321458989 CORE	86	Ti Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417712000	18.091226985 CORE	87	Ti Ti	0.0000	87
Ti	2.737453965	4.655174000	15.705780987 CORE	88	Ti Ti	0.0000	88
Ti	4.106179948	1.865009000	15.705780987 CORE	89	Ti Ti	0.0000	89
Ti	1.368726983	3.207877000	18.091226985 CORE	90	Ti Ti	0.0000	90

end
end

6. anatase (112) with three layers TiO₂-II structure (state 4 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000		
O	5.441341723	1.250873690	23.721011921 CORE	1	O O	0.0000	1	
O	2.794603032	2.597087626	26.129264856 CORE	2	O O	0.0000	2	
O	5.424499888	3.820088526	28.437537805 CORE	3	O O	0.0000	3	
O	4.050151997	4.780282028	30.734501831 CORE	4	O O	0.0000	4	
O	0.071920881	3.799635893	33.121550258 CORE	5	O O	0.0000	5	
O	3.750571582	4.796980518	35.238013239 CORE	6	O O	0.0000	6	
O	1.433393827	1.036016686	28.442253613 CORE	7	O O	0.0000	7	
O	2.835158752	1.989121375	30.740090869 CORE	8	O O	0.0000	8	
O	1.324412046	1.000175941	33.134675676 CORE	9	O O	0.0000	9	
O	4.135061640	1.064774807	33.063043403 CORE	10	O O	0.0000	10	

O	1.404243958	4.041709404	23.720928284 CORE	11 O O	0.0000	11
O	4.055393022	5.387162363	26.128884659 CORE	12 O O	0.0000	12
O	4.166555729	0.907895098	28.704965294 CORE	13 O O	0.0000	13
O	1.290780410	4.845526136	30.940038737 CORE	14 O O	0.0000	14
O	2.738221586	3.847358648	33.055541295 CORE	15 O O	0.0000	15
O	1.392288442	1.999514278	21.827552261 CORE	16 O O	0.0000	16
O	4.134116309	3.316213193	24.176023450 CORE	17 O O	0.0000	17
O	1.298213001	4.567172381	26.463745461 CORE	18 O O	0.0000	18
O	2.713471780	0.526876030	24.176347543 CORE	19 O O	0.0000	19
O	0.082015313	1.775668895	26.462727743 CORE	20 O O	0.0000	20
O	2.690804261	3.694563847	28.714620032 CORE	21 O O	0.0000	21
O	0.124474491	2.048774108	30.940562487 CORE	22 O O	0.0000	22
O	5.452724985	4.790016675	21.827490420 CORE	23 O O	0.0000	23
O	3.126306269	2.012342497	35.243411188 CORE	24 O O	0.0000	24
O	2.715204893	5.527304037	21.388372808 CORE	25 O O	0.0000	25
O	4.129687156	2.737504101	21.388585994 CORE	26 O O	0.0000	26
O	4.106653120	0.677791622	19.466395241 CORE	27 O O	0.0000	27
O	2.737426895	3.468139727	19.466497031 CORE	28 O O	0.0000	28
Ti	0.017274865	3.014076552	22.780002061 CORE	29 Ti Ti	0.0000	29
Ti	2.758020660	4.328499731	25.129625059 CORE	30 Ti Ti	0.0000	30
Ti	0.003475537	0.114808970	27.475524348 CORE	31 Ti Ti	0.0000	31
Ti	2.764610929	0.443494995	29.752388287 CORE	32 Ti Ti	0.0000	32
Ti	0.061403573	0.479291702	31.926524741 CORE	33 Ti Ti	0.0000	33
Ti	2.887912325	0.551981311	34.224148185 CORE	34 Ti Ti	0.0000	34
Ti	1.352552044	0.223280742	22.779545571 CORE	35 Ti Ti	0.0000	35
Ti	4.088356325	1.535905123	25.128931713 CORE	36 Ti Ti	0.0000	36
Ti	1.383191664	2.898828479	27.486482574 CORE	37 Ti Ti	0.0000	37
Ti	4.105092647	3.233461632	29.748225687 CORE	38 Ti Ti	0.0000	38
Ti	1.336232073	3.275170145	31.917933264 CORE	39 Ti Ti	0.0000	39
Ti	3.987131288	3.341418764	34.216460612 CORE	40 Ti Ti	0.0000	40
Ti	2.746737147	1.707856727	20.438797248 CORE	41 Ti Ti	0.0000	41
Ti	4.096935193	4.497786034	20.438536896 CORE	42 Ti Ti	0.0000	42
O	2.669489966	0.385907000	2.512823998 CORE	43 O O	0.0000	43
O	0.012247000	1.806836000	4.780557996 CORE	44 O O	0.0000	44
O	2.731408965	3.108716000	7.157657994 CORE	45 O O	0.0000	45
O	0.013680000	4.461563000	9.542228992 CORE	46 O O	0.0000	46
O	2.740277965	0.208281000	11.930501990 CORE	47 O O	0.0000	47
O	5.471556100	1.568399000	14.303808988 CORE	48 O O	0.0000	48
O	4.112225948	0.318550000	7.157657994 CORE	49 O O	0.0000	49
O	1.355046983	1.671398000	9.542228992 CORE	50 O O	0.0000	50
O	4.103355948	2.998447000	11.930501990 CORE	51 O O	0.0000	51
O	1.372077983	4.358565000	14.303808988 CORE	52 O O	0.0000	52
O	4.174143947	3.176073000	2.512823998 CORE	53 O O	0.0000	53
O	1.356479983	4.597002000	4.780558996 CORE	54 O O	0.0000	54

O	4.095349948	0.906552000	9.961921992 CORE	55 O O	0.0000	55
O	1.366850983	2.263596000	12.336128990 CORE	56 O O	0.0000	56
O	4.001488949	1.084165000	0.506720000 CORE	57 O O	0.0000	57
O	1.366244983	2.490754000	2.768651998 CORE	58 O O	0.0000	58
O	4.094195948	3.825713000	5.200810996 CORE	59 O O	0.0000	59
O	1.371565983	5.165037000	7.579951994 CORE	60 O O	0.0000	60
O	2.749437965	1.035547000	5.200810996 CORE	61 O O	0.0000	61
O	5.472068100	2.374871000	7.579951994 CORE	62 O O	0.0000	62
O	2.748283965	3.696718000	9.961921992 CORE	63 O O	0.0000	63
O	0.001875000	5.053761000	12.336128990 CORE	64 O O	0.0000	64
O	2.842144964	3.874331000	0.506720000 CORE	65 O O	0.0000	65
O	0.002482000	5.280919000	2.768651998 CORE	66 O O	0.0000	66
O	2.737453965	2.892390000	16.698125986 CORE	67 O O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235259000	19.083572984 CORE	68 O O	0.0000	68
O	4.106179948	0.102224000	16.698125986 CORE	69 O O	0.0000	69
O	1.368726983	1.445093000	19.083572984 CORE	70 O O	0.0000	70
O	4.106179948	3.627793000	14.713434988 CORE	71 O O	0.0000	71
O	1.368726983	4.970662000	17.098880986 CORE	72 O O	0.0000	72
O	2.737453965	0.837628000	14.713434988 CORE	73 O O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180496000	17.098880986 CORE	74 O O	0.0000	74
Ti	2.974929962	2.347366000	1.498959999 CORE	75 Ti Ti	0.0000	75
Ti	0.126369998	3.554143000	3.803964997 CORE	76 Ti Ti	0.0000	76
Ti	2.814535964	4.907998000	6.181838995 CORE	77 Ti Ti	0.0000	77
Ti	0.045219999	0.638905000	8.558601993 CORE	78 Ti Ti	0.0000	78
Ti	2.759544965	1.978347000	10.944570991 CORE	79 Ti Ti	0.0000	79
Ti	0.005683000	3.317790000	13.321458989 CORE	80 Ti Ti	0.0000	80
Ti	1.242356984	0.763977000	3.803964997 CORE	81 Ti Ti	0.0000	81
Ti	4.029097949	2.117832000	6.181838995 CORE	82 Ti Ti	0.0000	82
Ti	1.323505983	3.429071000	8.558601993 CORE	83 Ti Ti	0.0000	83
Ti	4.084088948	4.768513000	10.944570991 CORE	84 Ti Ti	0.0000	84
Ti	3.868703951	5.137532000	1.498959999 CORE	85 Ti Ti	0.0000	85
Ti	1.363042983	0.527624000	13.321458989 CORE	86 Ti Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417712000	18.091226985 CORE	87 Ti Ti	0.0000	87
Ti	2.737453965	4.655174000	15.705780987 CORE	88 Ti Ti	0.0000	88
Ti	4.106179948	1.865009000	15.705780987 CORE	89 Ti Ti	0.0000	89
Ti	1.368726983	3.207877000	18.091226985 CORE	90 Ti Ti	0.0000	90
end						
end						

7. anatase (112) with subsurface two layers TiO₂-II structure (state 3 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000		
O	5.441359712	1.237880649	23.656023045 CORE	1 O O	0.0000	1		
O	2.788180579	2.537072890	26.044046020 CORE	2 O O	0.0000	2		

O	5.400420863	3.753841946	28.312557345 CORE	3 O O	0.0000	3
O	2.649239816	3.667301628	28.607175660 CORE	4 O O	0.0000	4
O	0.156065647	4.040403216	33.043495494 CORE	5 O O	0.0000	5
O	2.908600912	5.283966117	35.035274753 CORE	6 O O	0.0000	6
O	1.440433573	0.964390062	28.310771243 CORE	7 O O	0.0000	7
O	2.767535508	1.856551999	30.570872825 CORE	8 O O	0.0000	8
O	1.201460415	1.250227861	33.043573574 CORE	9 O O	0.0000	9
O	3.934196208	2.492243403	35.030672033 CORE	10 O O	0.0000	10
O	1.401837092	4.028067599	23.656861559 CORE	11 O O	0.0000	11
O	4.054646600	5.327415512	26.043949633 CORE	12 O O	0.0000	12
O	4.073474670	4.649212325	30.569902294 CORE	13 O O	0.0000	13
O	1.344970123	4.828722116	30.896975557 CORE	14 O O	0.0000	14
O	3.990708398	0.423703810	32.885568104 CORE	15 O O	0.0000	15
O	1.401124622	2.000540454	21.795666702 CORE	16 O O	0.0000	16
O	4.130417014	3.286817639	24.109270294 CORE	17 O O	0.0000	17
O	1.292386332	4.501508789	26.360165271 CORE	18 O O	0.0000	18
O	2.713761446	0.496090973	24.107909933 CORE	19 O O	0.0000	19
O	0.075570746	1.710275625	26.356270936 CORE	20 O O	0.0000	20
O	4.191494169	0.877711246	28.605265844 CORE	21 O O	0.0000	21
O	5.493532107	2.037849972	30.892053304 CORE	22 O O	0.0000	22
O	5.441974579	4.790344427	21.796119272 CORE	23 O O	0.0000	23
O	2.841366362	3.213161900	32.886333110 CORE	24 O O	0.0000	24
O	2.713978053	5.527879561	21.353536757 CORE	25 O O	0.0000	25
O	4.128234203	2.737911667	21.354653694 CORE	26 O O	0.0000	26
O	4.096801658	0.677708878	19.435625931 CORE	27 O O	0.0000	27
O	2.748371193	3.467162553	19.434129785 CORE	28 O O	0.0000	28
Ti	0.013453415	3.016828146	22.729950610 CORE	29 Ti Ti	0.0000	29
Ti	2.744585254	4.293547335	25.050603222 CORE	30 Ti Ti	0.0000	30
Ti	5.461239202	5.624001723	27.376267266 CORE	31 Ti Ti	0.0000	31
Ti	2.766035003	0.319239856	29.599312118 CORE	32 Ti Ti	0.0000	32
Ti	5.584714906	0.381488466	31.842011046 CORE	33 Ti Ti	0.0000	33
Ti	2.910106430	1.242426617	34.050035294 CORE	34 Ti Ti	0.0000	34
Ti	1.354710056	0.226831014	22.729671902 CORE	35 Ti Ti	0.0000	35
Ti	4.096744851	1.504852479	25.049709858 CORE	36 Ti Ti	0.0000	36
Ti	1.378084359	2.833428506	27.375923050 CORE	37 Ti Ti	0.0000	37
Ti	4.072299725	3.110237638	29.599292512 CORE	38 Ti Ti	0.0000	38
Ti	1.248965382	3.171449143	31.843856654 CORE	39 Ti Ti	0.0000	39
Ti	3.925248750	4.032129280	34.049305851 CORE	40 Ti Ti	0.0000	40
Ti	2.749781937	1.712531708	20.414858479 CORE	41 Ti Ti	0.0000	41
Ti	4.093526438	4.502767233	20.415103448 CORE	42 Ti Ti	0.0000	42
O	2.669493428	0.385909144	2.512824014 CORE	43 O O	0.0000	43
O	0.012247016	1.806846037	4.780558026 CORE	44 O O	0.0000	44
O	2.731412507	3.108733270	7.157658040 CORE	45 O O	0.0000	45
O	0.013680018	4.461587785	9.542229053 CORE	46 O O	0.0000	46

O	2.740281519	0.208282157	11.930502066 CORE	47	O O	0.0000	47
O	5.471563196	1.568407713	14.303809079 CORE	48	O O	0.0000	48
O	4.112231281	0.318551770	7.157658040 CORE	49	O O	0.0000	49
O	1.355048740	1.671407285	9.542229053 CORE	50	O O	0.0000	50
O	4.103361269	2.998463657	11.930502066 CORE	51	O O	0.0000	51
O	1.372079762	4.358589213	14.303809079 CORE	52	O O	0.0000	52
O	4.174149360	3.176090644	2.512824014 CORE	53	O O	0.0000	53
O	1.356481742	4.597027538	4.780559026 CORE	54	O O	0.0000	54
O	4.095355259	0.906557036	9.961922055 CORE	55	O O	0.0000	55
O	1.366852756	2.263608575	12.336129068 CORE	56	O O	0.0000	56
O	4.001494138	1.084171023	0.506720003 CORE	57	O O	0.0000	57
O	1.366246755	2.490767837	2.768652016 CORE	58	O O	0.0000	58
O	4.094201257	3.825734253	5.200811029 CORE	59	O O	0.0000	59
O	1.371567762	5.165065693	7.579952042 CORE	60	O O	0.0000	60
O	2.749441531	1.035552753	5.200811029 CORE	61	O O	0.0000	61
O	5.472075196	2.374884193	7.579952042 CORE	62	O O	0.0000	62
O	2.748287529	3.696738536	9.961922055 CORE	63	O O	0.0000	63
O	0.001875002	5.053789075	12.336129068 CORE	64	O O	0.0000	64
O	2.842148650	3.874352523	0.506720003 CORE	65	O O	0.0000	65
O	0.002482003	5.280948337	2.768652016 CORE	66	O O	0.0000	66
O	2.737457515	2.892406068	16.698126092 CORE	67	O O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235282528	19.083573105 CORE	68	O O	0.0000	68
O	4.106185273	0.102224568	16.698126092 CORE	69	O O	0.0000	69
O	1.368728758	1.445101028	19.083573105 CORE	70	O O	0.0000	70
O	4.106185273	3.627813153	14.713435082 CORE	71	O O	0.0000	71
O	1.368728758	4.970689613	17.098881095 CORE	72	O O	0.0000	72
O	2.737457515	0.837632653	14.713435082 CORE	73	O O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180508113	17.098881095 CORE	74	O O	0.0000	74
Ti	2.974933820	2.347379040	1.498960009 CORE	75	Ti Ti	0.0000	75
Ti	0.126370162	3.554162744	3.803965021 CORE	76	Ti Ti	0.0000	76
Ti	2.814539614	4.908025265	6.181839034 CORE	77	Ti Ti	0.0000	77
Ti	0.045220058	0.638908549	8.558602047 CORE	78	Ti Ti	0.0000	78
Ti	2.759548544	1.978357990	10.944571061 CORE	79	Ti Ti	0.0000	79
Ti	0.005683007	3.317808431	13.321459074 CORE	80	Ti Ti	0.0000	80
Ti	1.242358595	0.763981244	3.803965021 CORE	81	Ti Ti	0.0000	81
Ti	4.029103174	2.117843765	6.181839034 CORE	82	Ti Ti	0.0000	82
Ti	1.323507699	3.429090049	8.558602047 CORE	83	Ti Ti	0.0000	83
Ti	4.084094244	4.768539490	10.944571061 CORE	84	Ti Ti	0.0000	84
Ti	3.868708968	5.137560540	1.498960009 CORE	85	Ti Ti	0.0000	85
Ti	1.363044751	0.527626931	13.321459074 CORE	86	Ti Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417714320	18.091227100 CORE	87	Ti Ti	0.0000	87
Ti	2.737457515	4.655199861	15.705781087 CORE	88	Ti Ti	0.0000	88
Ti	4.106185273	1.865019361	15.705781087 CORE	89	Ti Ti	0.0000	89
Ti	1.368728758	3.207894821	18.091227100 CORE	90	Ti Ti	0.0000	90

end
end

8. anatase (112) with three layers TiO₂-II structure (state 4 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000		
O	5.436422813	1.283650302	23.684735923	CORE	1 O O	0.0000	1	
O	2.785543018	2.628966099	26.112970469	CORE	2 O O	0.0000	2	
O	5.396406096	3.854846585	28.331616528	CORE	3 O O	0.0000	3	
O	2.689563680	3.882014490	28.681092536	CORE	4 O O	0.0000	4	
O	0.024204604	3.938286522	32.955422209	CORE	5 O O	0.0000	5	
O	3.762657088	4.791606976	35.118110590	CORE	6 O O	0.0000	6	
O	1.436997209	1.063775110	28.332724120	CORE	7 O O	0.0000	7	
O	2.767945029	2.059655167	30.697201057	CORE	8 O O	0.0000	8	
O	1.327747829	1.145729149	32.945469658	CORE	9 O O	0.0000	9	
O	3.027415664	2.005080257	35.103443516	CORE	10 O O	0.0000	10	
O	1.403199812	4.073905280	23.683796058	CORE	11 O O	0.0000	11	
O	4.051850948	5.419860509	26.112648900	CORE	12 O O	0.0000	12	
O	4.069491005	4.851070907	30.693489154	CORE	13 O O	0.0000	13	
O	1.309328775	5.042906082	30.790077104	CORE	14 O O	0.0000	14	
O	4.183302773	1.094147510	32.968773396	CORE	15 O O	0.0000	15	
O	1.399358008	2.029207081	21.808675047	CORE	16 O O	0.0000	16	
O	4.117876999	3.333735931	24.144824906	CORE	17 O O	0.0000	17	
O	1.288470893	4.623606547	26.380582019	CORE	18 O O	0.0000	18	
O	2.719721399	0.544109431	24.144107812	CORE	19 O O	0.0000	19	
O	0.074730358	1.834169018	26.379298184	CORE	20 O O	0.0000	20	
O	4.144043149	1.092449995	28.679790657	CORE	21 O O	0.0000	21	
O	5.525047608	2.259765765	30.785961879	CORE	22 O O	0.0000	22	
O	5.439885245	4.819556732	21.809175670	CORE	23 O O	0.0000	23	
O	2.649065533	3.891834256	32.960232913	CORE	24 O O	0.0000	24	
O	2.705966919	5.541790032	21.364752743	CORE	25 O O	0.0000	25	
O	4.134488722	2.751463429	21.364868357	CORE	26 O O	0.0000	26	
O	4.091558951	0.682945757	19.438046266	CORE	27 O O	0.0000	27	
O	2.749596086	3.473800413	19.438962073	CORE	28 O O	0.0000	28	
Ti	0.008819894	3.049507020	22.752937148	CORE	29 Ti Ti	0.0000	29	
Ti	2.736652894	4.366112383	25.098857871	CORE	30 Ti Ti	0.0000	30	
Ti	5.496142070	5.573259866	27.424907815	CORE	31 Ti Ti	0.0000	31	
Ti	2.690340440	-0.076839864	29.598825679	CORE	32 Ti Ti	0.0000	32	
Ti	5.383447435	-0.121486688	31.911698443	CORE	33 Ti Ti	0.0000	33	
Ti	2.907196286	0.541695487	34.069653731	CORE	34 Ti Ti	0.0000	34	
Ti	1.355092819	0.259568397	22.751648464	CORE	35 Ti Ti	0.0000	35	
Ti	4.099705937	1.575439972	25.096173590	CORE	36 Ti Ti	0.0000	36	
Ti	1.338716742	2.783223979	27.421882706	CORE	37 Ti Ti	0.0000	37	

Ti	4.142025782	2.714790572	29.594673956 CORE	38 Ti Ti	0.0000	38
Ti	1.448177066	2.673487807	31.904920498 CORE	39 Ti Ti	0.0000	39
Ti	3.908337283	3.336009747	34.078162378 CORE	40 Ti Ti	0.0000	40
Ti	2.746304778	1.723931508	20.423142827 CORE	41 Ti Ti	0.0000	41
Ti	4.095104849	4.514829197	20.421681588 CORE	42 Ti Ti	0.0000	42
O	2.669493428	0.385909144	2.512824014 CORE	43 O O	0.0000	43
O	0.012247016	1.806846037	4.780558026 CORE	44 O O	0.0000	44
O	2.731412507	3.108733270	7.157658040 CORE	45 O O	0.0000	45
O	0.013680018	4.461587785	9.542229053 CORE	46 O O	0.0000	46
O	2.740281519	0.208282157	11.930502066 CORE	47 O O	0.0000	47
O	5.471563196	1.568407713	14.303809079 CORE	48 O O	0.0000	48
O	4.112231281	0.318551770	7.157658040 CORE	49 O O	0.0000	49
O	1.355048740	1.671407285	9.542229053 CORE	50 O O	0.0000	50
O	4.103361269	2.998463657	11.930502066 CORE	51 O O	0.0000	51
O	1.372079762	4.358589213	14.303809079 CORE	52 O O	0.0000	52
O	4.174149360	3.176090644	2.512824014 CORE	53 O O	0.0000	53
O	1.356481742	4.597027538	4.780559026 CORE	54 O O	0.0000	54
O	4.095355259	0.906557036	9.961922055 CORE	55 O O	0.0000	55
O	1.366852756	2.263608575	12.336129068 CORE	56 O O	0.0000	56
O	4.001494138	1.084171023	0.506720003 CORE	57 O O	0.0000	57
O	1.366246755	2.490767837	2.768652016 CORE	58 O O	0.0000	58
O	4.094201257	3.825734253	5.200811029 CORE	59 O O	0.0000	59
O	1.371567762	5.165065693	7.579952042 CORE	60 O O	0.0000	60
O	2.749441531	1.035552753	5.200811029 CORE	61 O O	0.0000	61
O	5.472075196	2.374884193	7.579952042 CORE	62 O O	0.0000	62
O	2.748287529	3.696738536	9.961922055 CORE	63 O O	0.0000	63
O	0.001875002	5.053789075	12.336129068 CORE	64 O O	0.0000	64
O	2.842148650	3.874352523	0.506720003 CORE	65 O O	0.0000	65
O	0.002482003	5.280948337	2.768652016 CORE	66 O O	0.0000	66
O	2.737457515	2.892406068	16.698126092 CORE	67 O O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235282528	19.083573105 CORE	68 O O	0.0000	68
O	4.106185273	0.102224568	16.698126092 CORE	69 O O	0.0000	69
O	1.368728758	1.445101028	19.083573105 CORE	70 O O	0.0000	70
O	4.106185273	3.627813153	14.713435082 CORE	71 O O	0.0000	71
O	1.368728758	4.970689613	17.098881095 CORE	72 O O	0.0000	72
O	2.737457515	0.837632653	14.713435082 CORE	73 O O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180508113	17.098881095 CORE	74 O O	0.0000	74
Ti	2.974933820	2.347379040	1.498960009 CORE	75 Ti Ti	0.0000	75
Ti	0.126370162	3.554162744	3.803965021 CORE	76 Ti Ti	0.0000	76
Ti	2.814539614	4.908025265	6.181839034 CORE	77 Ti Ti	0.0000	77
Ti	0.045220058	0.638908549	8.558602047 CORE	78 Ti Ti	0.0000	78
Ti	2.759548544	1.978357990	10.944571061 CORE	79 Ti Ti	0.0000	79
Ti	0.005683007	3.317808431	13.321459074 CORE	80 Ti Ti	0.0000	80
Ti	1.242358595	0.763981244	3.803965021 CORE	81 Ti Ti	0.0000	81

Ti	4.029103174	2.117843765	6.181839034	CORE	82 Ti Ti	0.0000	82
Ti	1.323507699	3.429090049	8.558602047	CORE	83 Ti Ti	0.0000	83
Ti	4.084094244	4.768539490	10.944571061	CORE	84 Ti Ti	0.0000	84
Ti	3.868708968	5.137560540	1.498960009	CORE	85 Ti Ti	0.0000	85
Ti	1.363044751	0.527626931	13.321459074	CORE	86 Ti Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417714320	18.091227100	CORE	87 Ti Ti	0.0000	87
Ti	2.737457515	4.655199861	15.705781087	CORE	88 Ti Ti	0.0000	88
Ti	4.106185273	1.865019361	15.705781087	CORE	89 Ti Ti	0.0000	89
Ti	1.368728758	3.207894821	18.091227100	CORE	90 Ti Ti	0.0000	90

end

end

9. anatase (112) with subsurface two layers TiO₂-II structure (state 3 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000		
O	5.444387835	1.243702568	23.678678210	CORE	1 O O	0.0000	1	
O	2.785767232	2.560583508	26.063967733	CORE	2 O O	0.0000	2	
O	5.408349225	3.779403754	28.358342747	CORE	3 O O	0.0000	3	
O	2.661181433	3.681292313	28.643616907	CORE	4 O O	0.0000	4	
O	0.160392670	4.051754874	33.081348495	CORE	5 O O	0.0000	5	
O	2.905302105	5.290995559	35.082192658	CORE	6 O O	0.0000	6	
O	1.435443711	0.989884254	28.358667817	CORE	7 O O	0.0000	7	
O	2.768246458	1.897245473	30.622328768	CORE	8 O O	0.0000	8	
O	1.205732644	1.262188832	33.082883167	CORE	9 O O	0.0000	9	
O	3.939338705	2.499259887	35.082527082	CORE	10 O O	0.0000	10	
O	1.401475455	4.034416943	23.678864416	CORE	11 O O	0.0000	11	
O	4.058105289	5.350325303	26.064896368	CORE	12 O O	0.0000	12	
O	4.073927475	4.685806071	30.622210993	CORE	13 O O	0.0000	13	
O	1.352070125	4.843330901	30.940010101	CORE	14 O O	0.0000	14	
O	3.998904314	0.433559180	32.936273880	CORE	15 O O	0.0000	15	
O	1.399072330	2.001568374	21.803916860	CORE	16 O O	0.0000	16	
O	4.130049665	3.298442293	24.126971318	CORE	17 O O	0.0000	17	
O	1.295261329	4.533050236	26.393610639	CORE	18 O O	0.0000	18	
O	2.716864118	0.508282934	24.125954480	CORE	19 O O	0.0000	19	
O	0.074097727	1.741644518	26.393452401	CORE	20 O O	0.0000	20	
O	4.182199206	0.890431041	28.646506766	CORE	21 O O	0.0000	21	
O	5.491881426	2.052603002	30.938581650	CORE	22 O O	0.0000	22	
O	5.447510607	4.791354341	21.803831726	CORE	23 O O	0.0000	23	
O	2.841997097	3.224338431	32.940024375	CORE	24 O O	0.0000	24	
O	2.717804109	5.529785377	21.363537993	CORE	25 O O	0.0000	25	
O	4.127463806	2.739813585	21.364058825	CORE	26 O O	0.0000	26	
O	4.096480738	0.677973810	19.440673064	CORE	27 O O	0.0000	27	
O	2.750137284	3.466762650	19.439003062	CORE	28 O O	0.0000	28	
Ti	0.012472823	3.021679785	22.744951555	CORE	29 Ti Ti	0.0000	29	
Ti	2.746994457	4.305570450	25.071936274	CORE	30 Ti Ti	0.0000	30	

Ti	5.458836072	0.091153112	27.411956538 CORE	31 Ti Ti	0.0000	31
Ti	2.756027850	0.362631358	29.651771882 CORE	32 Ti Ti	0.0000	32
Ti	5.584522753	0.390368552	31.887266767 CORE	33 Ti Ti	0.0000	33
Ti	2.912283783	1.253095447	34.098929396 CORE	34 Ti Ti	0.0000	34
Ti	1.359281954	0.232321887	22.745569614 CORE	35 Ti Ti	0.0000	35
Ti	4.098698372	1.515913464	25.072516302 CORE	36 Ti Ti	0.0000	36
Ti	1.385530062	2.882465210	27.412754795 CORE	37 Ti Ti	0.0000	37
Ti	4.087199916	3.150957084	29.651062875 CORE	38 Ti Ti	0.0000	38
Ti	1.258443320	3.180302132	31.887331449 CORE	39 Ti Ti	0.0000	39
Ti	3.930620501	4.042173295	34.101396313 CORE	40 Ti Ti	0.0000	40
Ti	2.748686485	1.715099298	20.421625801 CORE	41 Ti Ti	0.0000	41
Ti	4.097207970	4.504678633	20.423775193 CORE	42 Ti Ti	0.0000	42
O	2.669493428	0.385909144	2.512824014 CORE	43 O O	0.0000	43
O	0.012247016	1.806846037	4.780558026 CORE	44 O O	0.0000	44
O	2.731412507	3.108733270	7.157658040 CORE	45 O O	0.0000	45
O	0.013680018	4.461587785	9.542229053 CORE	46 O O	0.0000	46
O	2.740281519	0.208282157	11.930502066 CORE	47 O O	0.0000	47
O	5.471563196	1.568407713	14.303809079 CORE	48 O O	0.0000	48
O	4.112231281	0.318551770	7.157658040 CORE	49 O O	0.0000	49
O	1.355048740	1.671407285	9.542229053 CORE	50 O O	0.0000	50
O	4.103361269	2.998463657	11.930502066 CORE	51 O O	0.0000	51
O	1.372079762	4.358589213	14.303809079 CORE	52 O O	0.0000	52
O	4.174149360	3.176090644	2.512824014 CORE	53 O O	0.0000	53
O	1.356481742	4.597027538	4.780559026 CORE	54 O O	0.0000	54
O	4.095355259	0.906557036	9.961922055 CORE	55 O O	0.0000	55
O	1.366852756	2.263608575	12.336129068 CORE	56 O O	0.0000	56
O	4.001494138	1.084171023	0.506720003 CORE	57 O O	0.0000	57
O	1.366246755	2.490767837	2.768652016 CORE	58 O O	0.0000	58
O	4.094201257	3.825734253	5.200811029 CORE	59 O O	0.0000	59
O	1.371567762	5.165065693	7.579952042 CORE	60 O O	0.0000	60
O	2.749441531	1.035552753	5.200811029 CORE	61 O O	0.0000	61
O	5.472075196	2.374884193	7.579952042 CORE	62 O O	0.0000	62
O	2.748287529	3.696738536	9.961922055 CORE	63 O O	0.0000	63
O	0.001875002	5.053789075	12.336129068 CORE	64 O O	0.0000	64
O	2.842148650	3.874352523	0.506720003 CORE	65 O O	0.0000	65
O	0.002482003	5.280948337	2.768652016 CORE	66 O O	0.0000	66
O	2.737457515	2.892406068	16.698126092 CORE	67 O O	0.0000	67
O	0.000000000	4.235282528	19.083573105 CORE	68 O O	0.0000	68
O	4.106185273	0.102224568	16.698126092 CORE	69 O O	0.0000	69
O	1.368728758	1.445101028	19.083573105 CORE	70 O O	0.0000	70
O	4.106185273	3.627813153	14.713435082 CORE	71 O O	0.0000	71
O	1.368728758	4.970689613	17.098881095 CORE	72 O O	0.0000	72
O	2.737457515	0.837632653	14.713435082 CORE	73 O O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180508113	17.098881095 CORE	74 O O	0.0000	74

Ti	2.974933820	2.347379040	1.498960009 CORE	75 Ti Ti	0.0000	75
Ti	0.126370162	3.554162744	3.803965021 CORE	76 Ti Ti	0.0000	76
Ti	2.814539614	4.908025265	6.181839034 CORE	77 Ti Ti	0.0000	77
Ti	0.045220058	0.638908549	8.558602047 CORE	78 Ti Ti	0.0000	78
Ti	2.759548544	1.978357990	10.944571061 CORE	79 Ti Ti	0.0000	79
Ti	0.005683007	3.317808431	13.321459074 CORE	80 Ti Ti	0.0000	80
Ti	1.242358595	0.763981244	3.803965021 CORE	81 Ti Ti	0.0000	81
Ti	4.029103174	2.117843765	6.181839034 CORE	82 Ti Ti	0.0000	82
Ti	1.323507699	3.429090049	8.558602047 CORE	83 Ti Ti	0.0000	83
Ti	4.084094244	4.768539490	10.944571061 CORE	84 Ti Ti	0.0000	84
Ti	3.868708968	5.137560540	1.498960009 CORE	85 Ti Ti	0.0000	85
Ti	1.363044751	0.527626931	13.321459074 CORE	86 Ti Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417714320	18.091227100 CORE	87 Ti Ti	0.0000	87
Ti	2.737457515	4.655199861	15.705781087 CORE	88 Ti Ti	0.0000	88
Ti	4.106185273	1.865019361	15.705781087 CORE	89 Ti Ti	0.0000	89
Ti	1.368728758	3.207894821	18.091227100 CORE	90 Ti Ti	0.0000	90

end

end

10. anatase (112) with four layer brookite structure (state 5 in Figure 3)

PBC	5.4749	5.5803	47.1748	90.0000	90.0000	90.0000		
O	5.524700778	1.320604583	23.727466173 CORE	1 O O	0.0000	1		
O	2.611720967	2.519781643	25.876575269 CORE	2 O O	0.0000	2		
O	5.573939249	0.501260377	28.241879162 CORE	3 O O	0.0000	3		
O	2.840233892	1.345071250	28.381457051 CORE	4 O O	0.0000	4		
O	0.175964993	1.452326371	32.949887988 CORE	5 O O	0.0000	5		
O	2.907848910	2.639870324	34.898067867 CORE	6 O O	0.0000	6		
O	1.273029012	-2.289354556	28.242227317 CORE	7 O O	0.0000	7		
O	2.644985240	-0.648310181	30.340433478 CORE	8 O O	0.0000	8		
O	1.193341999	-1.338603239	32.950096071 CORE	9 O O	0.0000	9		
O	3.936876194	-0.149194909	34.898813382 CORE	10 O O	0.0000	10		
O	1.319085965	4.110577314	23.727599715 CORE	11 O O	0.0000	11		
O	4.233806219	5.310029860	25.876137485 CORE	12 O O	0.0000	12		
O	4.200926151	2.141913685	30.340918902 CORE	13 O O	0.0000	13		
O	1.435954835	2.201444345	30.856527247 CORE	14 O O	0.0000	14		
O	3.953778605	-2.242454731	32.725210558 CORE	15 O O	0.0000	15		
O	1.413807982	2.036810451	21.794248351 CORE	16 O O	0.0000	16		
O	4.041635161	3.301223487	23.991214804 CORE	17 O O	0.0000	17		
O	-0.108223025	2.515507423	26.305357849 CORE	18 O O	0.0000	18		
O	2.802984863	0.511590282	23.991380481 CORE	19 O O	0.0000	19		
O	1.479450598	-0.275127867	26.305189587 CORE	20 O O	0.0000	20		
O	4.007296298	-1.444974541	28.382148719 CORE	21 O O	0.0000	21		
O	5.409411488	-0.588440048	30.856809149 CORE	22 O O	0.0000	22		
O	5.429539355	4.826880422	21.793867050 CORE	23 O O	0.0000	23		

O	2.891675380	0.546517750	32.727472562 CORE	24	O	O	0.0000	24
O	2.685847137	5.526166130	21.321127105 CORE	25	O	O	0.0000	25
O	4.157695026	2.736294409	21.321291207 CORE	26	O	O	0.0000	26
O	4.096540201	0.681039923	19.425210811 CORE	27	O	O	0.0000	27
O	2.746833894	3.471307502	19.425318456 CORE	28	O	O	0.0000	28
Ti	0.014683758	3.048642397	22.721548052 CORE	29	Ti	Ti	0.0000	29
Ti	2.772826300	4.280716605	25.019440855 CORE	30	Ti	Ti	0.0000	30
Ti	5.522848017	-1.273762378	27.174832496 CORE	31	Ti	Ti	0.0000	31
Ti	2.810278749	-2.336466949	29.466011513 CORE	32	Ti	Ti	0.0000	32
Ti	5.588723897	-2.275106352	31.746003432 CORE	33	Ti	Ti	0.0000	33
Ti	2.913553777	-1.394513372	33.916920167 CORE	34	Ti	Ti	0.0000	34
Ti	1.353960328	0.257992137	22.721532784 CORE	35	Ti	Ti	0.0000	35
Ti	4.071129487	1.488990352	25.019003701 CORE	36	Ti	Ti	0.0000	36
Ti	1.323488653	1.516377619	27.174547992 CORE	37	Ti	Ti	0.0000	37
Ti	4.036860087	0.453628799	29.465431636 CORE	38	Ti	Ti	0.0000	38
Ti	1.256660741	0.514180140	31.745491693 CORE	39	Ti	Ti	0.0000	39
Ti	3.931098849	1.393184476	33.916798152 CORE	40	Ti	Ti	0.0000	40
Ti	2.751924551	1.716050381	20.405144333 CORE	41	Ti	Ti	0.0000	41
Ti	4.091238724	4.506392903	20.404904267 CORE	42	Ti	Ti	0.0000	42
O	2.669493428	0.385909144	2.512824014 CORE	43	O	O	0.0000	43
O	0.012247016	1.806846037	4.780558026 CORE	44	O	O	0.0000	44
O	2.731412507	3.108733270	7.157658040 CORE	45	O	O	0.0000	45
O	0.013680018	4.461587785	9.542229053 CORE	46	O	O	0.0000	46
O	2.740281519	0.208282157	11.930502066 CORE	47	O	O	0.0000	47
O	5.471563196	1.568407713	14.303809079 CORE	48	O	O	0.0000	48
O	4.112231281	0.318551770	7.157658040 CORE	49	O	O	0.0000	49
O	1.355048740	1.671407285	9.542229053 CORE	50	O	O	0.0000	50
O	4.103361269	2.998463657	11.930502066 CORE	51	O	O	0.0000	51
O	1.372079762	4.358589213	14.303809079 CORE	52	O	O	0.0000	52
O	4.174149360	3.176090644	2.512824014 CORE	53	O	O	0.0000	53
O	1.356481742	4.597027538	4.780559026 CORE	54	O	O	0.0000	54
O	4.095355259	0.906557036	9.961922055 CORE	55	O	O	0.0000	55
O	1.366852756	2.263608575	12.336129068 CORE	56	O	O	0.0000	56
O	4.001494138	1.084171023	0.506720003 CORE	57	O	O	0.0000	57
O	1.366246755	2.490767837	2.768652016 CORE	58	O	O	0.0000	58
O	4.094201257	3.825734253	5.200811029 CORE	59	O	O	0.0000	59
O	1.371567762	5.165065693	7.579952042 CORE	60	O	O	0.0000	60
O	2.749441531	1.035552753	5.200811029 CORE	61	O	O	0.0000	61
O	5.472075196	2.374884193	7.579952042 CORE	62	O	O	0.0000	62
O	2.748287529	3.696738536	9.961922055 CORE	63	O	O	0.0000	63
O	0.001875002	5.053789075	12.336129068 CORE	64	O	O	0.0000	64
O	2.842148650	3.874352523	0.506720003 CORE	65	O	O	0.0000	65
O	0.002482003	5.280948337	2.768652016 CORE	66	O	O	0.0000	66
O	2.737457515	2.892406068	16.698126092 CORE	67	O	O	0.0000	67

O	0.000000000	4.235282528	19.083573105 CORE	68 O O	0.0000	68
O	4.106185273	0.102224568	16.698126092 CORE	69 O O	0.0000	69
O	1.368728758	1.445101028	19.083573105 CORE	70 O O	0.0000	70
O	4.106185273	3.627813153	14.713435082 CORE	71 O O	0.0000	71
O	1.368728758	4.970689613	17.098881095 CORE	72 O O	0.0000	72
O	2.737457515	0.837632653	14.713435082 CORE	73 O O	0.0000	73
O	0.000000000	2.180508113	17.098881095 CORE	74 O O	0.0000	74
Ti	2.974933820	2.347379040	1.498960009 CORE	75 Ti Ti	0.0000	75
Ti	0.126370162	3.554162744	3.803965021 CORE	76 Ti Ti	0.0000	76
Ti	2.814539614	4.908025265	6.181839034 CORE	77 Ti Ti	0.0000	77
Ti	0.045220058	0.638908549	8.558602047 CORE	78 Ti Ti	0.0000	78
Ti	2.759548544	1.978357990	10.944571061 CORE	79 Ti Ti	0.0000	79
Ti	0.005683007	3.317808431	13.321459074 CORE	80 Ti Ti	0.0000	80
Ti	1.242358595	0.763981244	3.803965021 CORE	81 Ti Ti	0.0000	81
Ti	4.029103174	2.117843765	6.181839034 CORE	82 Ti Ti	0.0000	82
Ti	1.323507699	3.429090049	8.558602047 CORE	83 Ti Ti	0.0000	83
Ti	4.084094244	4.768539490	10.944571061 CORE	84 Ti Ti	0.0000	84
Ti	3.868708968	5.137560540	1.498960009 CORE	85 Ti Ti	0.0000	85
Ti	1.363044751	0.527626931	13.321459074 CORE	86 Ti Ti	0.0000	86
Ti	0.000000000	0.417714320	18.091227100 CORE	87 Ti Ti	0.0000	87
Ti	2.737457515	4.655199861	15.705781087 CORE	88 Ti Ti	0.0000	88
Ti	4.106185273	1.865019361	15.705781087 CORE	89 Ti Ti	0.0000	89
Ti	1.368728758	3.207894821	18.091227100 CORE	90 Ti Ti	0.0000	90
end						
end						