

Atomic coordinates for Fig. 3D, Fig. 4, Fig. S28, Fig. S29

```

Ga   Cu
1.0000000000000000
15.8199996948240003    0.0000000000000000    0.0000000000000000
0.0000000000000000    15.8199996948240003    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000    30.7639999389650001

Ga   Cu
196   4
Direct
0.3959041151365360    0.0400452304014069    0.2765197998912370
0.5664223551937513    0.0976789934464081    0.2528094687826750
0.2697671995948424    0.6032797533709851    0.7100149362855295
0.6178161718212677    0.4864178186315681    0.3624402883571630
0.7545067251073817    0.9552561988944657    0.3489641345205173
0.5192058268775078    0.9206956756733253    0.2700284786192716
0.77646699042722124    0.3527026830669044    0.4800391288665159
0.4288965442610261    0.8585911038452956    0.5532235416277340
0.4872900313706945    0.1022458800107893    0.6088957121149280
0.4667562300231032    0.7734259507731270    0.6533731090665429
0.3671892296712710    0.3570544911465248    0.7174156849841912
0.6311355936137859    0.7697192016780311    0.6182452560215604
0.8668227336984200    0.4779299664019257    0.7190890045510504
0.9790719519557163    0.9695192062369163    0.4113923821126222
0.8683301366593169    0.2799911998794820    0.6790675020594078
0.5509145298509882    0.2882030412390498    0.2711352984841098
0.8526735233553296    0.7942754029394650    0.6193633462079975
0.9153837079446403    0.1686534793698183    0.7529809833166357
0.4439329980747908    0.9235314166328434    0.4497185851945157
0.1548778564180016    0.1286182255429015    0.5834909302380648
0.5272451219945108    0.6892809916921598    0.5661152531679728
0.7514144748958482    0.1812118471644766    0.7351711383153919
0.0902079031553440    0.1939063432776479    0.5075363737486180
0.6936455143148356    0.6198232474118930    0.4660149403524844
0.9553500876024360    0.9400021668978747    0.6297873285583512
0.3282298949995371    0.1526739983023750    0.6299732800549023
0.2467238297944370    0.4588695681840031    0.6548333796181910
0.1915674528065859    0.2495739115881033    0.4343390769853419
0.7102733020856770    0.8936043916570212    0.5976087771294335
0.5180043117238454    0.8012119109638610    0.4065108765936413
0.9226241726311721    0.5266447762373485    0.6410073442635525
0.7587748940067830    0.6893190395411141    0.5691357378786421
0.2054146331291118    0.9455908058004578    0.2652476724669754
0.4828533029251126    0.4553341280859224    0.3143941436375443
0.2378818646766155    0.4231834438258109    0.2467972455656041
0.6934809685281710    0.2770075042301564    0.6596662991321771
0.4983803552918940    0.9938916923982479    0.5172279690026267
0.2242665795611181    0.1334377767535305    0.6986938350517731
0.9274526310374084    0.3021454064551247    0.4753116032687324
0.3811441302691123    0.3717921729879111    0.3790018166849236
0.5937416372000300    0.1406093363962482    0.7069891250575551
0.9932561497992243    0.4507667012726827    0.5167574993307048
0.5633806716841647    0.5739149221818741    0.6329590684619917
0.2666598605113121    0.3983501308725899    0.5336077850833499
0.1658167490484335    0.5303569609553151    0.5870458601414018
0.3362169243679325    0.0241006269560147    0.5402019509319146
0.4050279086267577    0.1017686924905694    0.4421899986188262
0.3507900207870049    0.1946179687652956    0.2358808375260263
0.5429958461536754    0.9176608333614866    0.6096623470824856
0.8613006345204808    0.0786221357620290    0.3428598740269094
0.7313418541347669    0.6340094941815002    0.6773669652038125
0.5066039075983697    0.2889494311970147    0.6918280661939336
0.1894124622148446    0.0208015037797045    0.3992138420690553
0.2746925500238569    0.9679711755657314    0.6929339309602962
0.0726086259304786    0.9792239718769880    0.3071999086263552
0.8902750273440405    0.4669228887163278    0.2402473750284330
0.1284515595383397    0.4452482091086752    0.3963499752955410
0.1925605793823088    0.6931715405450585    0.6127538930076951
0.5992017104678306    0.1779804396306885    0.4602753721648094
0.6415930407691421    0.5561743831448843    0.5440865367750227
0.7689875745999134    0.1256774818557281    0.2758118168052227
0.8174469681466195    0.4255634006776052    0.3294786187310257
0.1129244718261350    0.2875902527130322    0.3623846963765754
0.6782260090954126    0.0555432421540461    0.4065353754016541
0.0657761334831000    0.3455410984745663    0.5628163676574641

```

0.9035269588638263	0.2934538295599764	0.3645505834479361
0.7441692852611491	0.5706247634116673	0.2653762638456620
0.9787795072326583	0.4288664307998748	0.4260586826192476
0.4245575788422541	0.9899195300969080	0.6659447106592994
0.2804658850601855	0.3344504901115627	0.3299455118238476
0.4707493692358593	0.5441646929288666	0.7057446012354723
0.6212674529826189	0.3564957310274607	0.4509019946232798
0.1263812899839254	0.9301119479451639	0.7300583060557375
0.7362672080730720	0.7825590462826917	0.7290139941589675
0.1176115921067077	0.3716238636319546	0.4716269325211220
0.0833272481896317	0.4849251439476350	0.7278223923144191
0.6039843951681346	0.5940563079550774	0.7489957228232476
0.3595931078850897	0.5879286413751660	0.4488437915584402
0.6837258567797850	0.9822800462805744	0.2427599648192752
0.7748308821139864	0.2245660525143408	0.5396299103707933
0.4817203786750330	0.4217371951002831	0.6332516091139282
0.9116358946540219	0.8735496960391315	0.3546520486644515
0.5411784336425264	0.4949932793597956	0.4757855231830272
0.6202351188890832	0.8546398689353043	0.3354671886195604
0.9389148830917726	0.7323732998188992	0.2823896793203962
0.8320053362689511	0.9827910638541508	0.7569092471999380
0.6489357038047016	0.0807058454791993	0.5485746325662171
0.6605591511541631	0.3577538683603238	0.5385946159823933
0.0330675153680945	0.0559122612684274	0.7135130600413191
0.0638656317066237	0.6194328064844805	0.6807228748997208
0.0826780731936939	0.1899681038917476	0.7481281698152773
0.4211728862329855	0.8269199398723599	0.3339537615478585
0.3453391378733102	0.5307791809174481	0.3546646339227306
0.0231443249738968	0.0373135525819341	0.5666882070095882
0.7687896638409021	0.7855014539752172	0.4943413062221812
0.8923757728613700	0.3620705114656819	0.6075476654812304
0.0642099618042761	0.2114865353634072	0.6513334449917723
0.2739302847327201	0.8881001167982284	0.4872471912518789
0.0013325079488830	0.3302392233187418	0.7265536993843873
0.9324208661994436	0.1546792629765522	0.4182139410808502
0.3446481690365787	0.2029047720512158	0.3747725076624186
0.6178087927657405	0.2014805139150341	0.6024615641387248
0.3326243552012202	0.5529815695879090	0.5483593535191482
0.0358377853477543	0.6096761182594058	0.5332693940906710
0.8914525295005695	0.9134350112743019	0.5538908682520549
0.3022845707399679	0.8263297292001117	0.2567224169254743
0.0659241199708612	0.4346518332319640	0.6401613207166612
0.5018133355904111	0.3172490276532891	0.5558616805839932
0.6737605681448537	0.4505619914080790	0.7077120675592664
0.7395921042603915	0.2701076737101728	0.3757127082079524
0.1817344831517013	0.3082218903683839	0.7075405681121630
0.5178064514273786	0.5909400087321856	0.4098013903495318
0.4017233242442270	0.8491888699439275	0.7319424112145033
0.2476485213585944	0.0984315100255094	0.4722225849356744
0.2180316749704852	0.6337081219090793	0.2849206241738610
0.5895925214710438	0.8797079987357153	0.6957525743013847
0.2119677476884405	0.2982098441010730	0.6123878710298972
0.9845889980329614	0.4340127602085804	0.3361942308729583
0.6341868213588592	0.9528465558383015	0.4694627906225470
0.0404742985842621	0.8194495630892871	0.4593072322504327
0.9522007021529328	0.9057226587390654	0.7275810700312929
0.6604593467350638	0.0205741159804966	0.6527779669003758
0.3658329418101707	0.6850055149621384	0.2671168738221388
0.0798725935912678	0.1323863305481247	0.3667164567327789
0.2841665713177621	0.4553989183698430	0.4360240584105946
0.8101797771842206	0.9837129501854931	0.4425821796073464
0.1030003234409491	0.7774806941708653	0.2795643997224894
0.1235715326422847	0.9663036230790453	0.4909496531049967
0.1117002395847132	0.8884488952447012	0.6452254443244346
0.4736433293213801	0.9985524127132300	0.3667098416695190
0.8365407806970079	0.1143027060829740	0.5994798854045578
0.7095166880893201	0.8038909005587362	0.4180114425609481
0.9170352376278260	0.1249999973651230	0.4991554410373972
0.1977604371455390	0.5846180686025030	0.4042398726633658
0.5144943897143412	0.9838536069792613	0.7528053756551524
0.9000027115943482	0.5815054630961802	0.3129714103684464
0.8316329449574625	0.2801161885308466	0.2680586378036557
0.5844460868967125	0.3259274598784113	0.3672870133607128
0.9115832574482604	0.7390174519971361	0.4315808132386366
0.1785775800431893	0.8445848481468744	0.4124166389250444
0.7269022515797844	0.7222683334350406	0.3158986868305466
0.3064075160477445	0.9565112475897533	0.3427542760925427

0.0004076092439047	0.3084873782982472	0.2780960098159128
0.6599606724758738	0.4210939467658438	0.6223876150460896
0.6757028069553421	0.0167565514053265	0.7497921817069105
0.2301810210789671	0.1114630490383209	0.3223494015779399
0.9076457336445268	0.5745592157804513	0.4875887320362868
0.3884960499225966	0.2981515499451322	0.6202734949218741
0.2821975576128570	0.7129998693907682	0.3475462814991155
0.7726054356240710	0.4869003503774008	0.4383703805519904
0.9029934105617843	0.6769035557611437	0.6876519085353803
0.7735089403079548	0.1858270862606873	0.4642831198910380
0.6198338263847563	0.1031468888817480	0.3302519280527717
0.1604119949642913	0.9535809227884261	0.5767729782751938
0.9587458101699158	0.5893873194939777	0.4065895797684803
0.9616867363649781	0.2066398326276152	0.5751763852011050
0.5926822086553692	0.5369545810955125	0.2761551940534861
0.8010773205175431	0.4815024188483537	0.5632846793745930
0.0669936374254590	0.6252932881896617	0.3452190160359577
0.3159526518872338	0.8349695320989955	0.6318860993242795
0.7858728067005526	0.9161205268401482	0.6706998831382899
0.1714530025186745	0.5466053061790235	0.5021315042297679
0.9007502284096118	0.6392627473068828	0.5787825014404505
0.7751479941328081	0.9868862507699583	0.5223894097850011
0.3339248177181451	0.7555873387998767	0.4326879829981405
0.0126428067005526	0.7526059212410190	0.6247370495251569
0.9848181858284046	0.1550726460137076	0.2696321362684987
0.1349497575011243	0.4541641251826177	0.3011431127399501
0.2116835241768684	0.1003677447489431	0.2384231212720724
0.7693684750576373	0.5739403815805835	0.3703224343394353
0.1736609571182040	0.2615781724498376	0.2742394147420955
0.5721938669812442	0.7019040859694443	0.2438820203153264
0.1487446195327122	0.6915271762731627	0.4672054928702717
0.4580644262121488	0.6947078774185134	0.7372562546083140
0.0788599032614121	0.7878277246862002	0.5427927429723078
0.4733682220281281	0.1644257796383385	0.5276378712686296
0.3872796813356436	0.3618485484712752	0.2549101707419768
0.4689449468930676	0.4776642870724659	0.5499707094171994
0.4277450127717751	0.1631332118597437	0.7342645241051309
0.2834125624238727	0.7081504673067210	0.5187360439631812
0.3208925765854553	0.2356002213538417	0.5178087106113980
0.5387966802396569	0.7037054424265750	0.4790494862854940
0.4144623663616754	0.3936912904932246	0.4789328332748759
0.0516165621818948	0.7875674017404696	0.3645365665119005
0.5006981038705137	0.6520916661502757	0.3257482025984366
0.3723505095175554	0.5923276848833930	0.6354734782217418
0.0572649398087892	0.7766167198252431	0.7197838073739506
0.6076068758564996	0.8332415687339012	0.5316048653998068
0.8581525190709081	0.0961600893200672	0.6795116067288461
0.6956681431890973	0.3866363975945023	0.2779647866658264
0.2470072239955581	0.7812316094804006	0.7185788366632945
0.4681210611900619	0.1902946720783582	0.3138237392265535
0.8219690628411793	0.8729037431437591	0.2810542471545951
0.4703032630654227	0.2708089775944281	0.4196534499907098
0.2498837214489075	0.4538422519787902	0.7442483266704153
0.9232376525712199	0.7630427557661654	0.5360177626152289
0.0633677297749496	0.0862539289265536	0.4459158903784446
0.3572053668915696	0.7223701472422080	0.5863244201274016
0.6539932385648382	0.6818949745901766	0.3833423315126704
0.6100075724152716	0.7203082676522674	0.6995286887543785

Atomic coordinates for Fig. 4, Fig. S26, Fig. S29

Ga	Cu	
1.000000000000000		
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	15.8199996948240003
Ga	Cu	
196	4	
Direct		
0.9904729411427510	0.2535107942922019	0.0914081183804426
0.4022783018135628	0.0161255107134252	0.5597652006193941
0.0302485884358831	0.4065896479098765	0.9371258329591881
0.2687421248117330	0.2127198067748340	0.6903629085086046
0.5289041251854607	0.1675541382303372	0.8226894819176567

0.4182134991897603	0.5508503048743030	0.0559110300721140
0.2341945845865246	0.4621140610352819	0.3586737025122215
0.1507814387496803	0.0254540624078582	0.3897430275058353
0.7027609564397936	0.4132223780923571	0.5101096283224802
0.9076590349472142	0.1169734477178211	0.5826793075903629
0.1270167948313115	0.7711066826712852	0.7068808971177760
0.5979439569996173	0.1617197052446225	0.4376096153782283
0.6686348804816082	0.7501807783177704	0.1178831373239194
0.3506270503226150	0.0091569802676108	0.2865249026543054
0.6574090159987983	0.9523020015176760	0.2820035846626634
0.8514102442362356	0.2320666845606701	0.7829481658647317
0.3591166417291785	0.5159236668883592	0.4870286483649654
0.8409440209045907	0.6226049650240850	0.7235350154703488
0.0635762207659639	0.1539283660684113	0.2222689256486192
0.3387786460690119	0.3082100956748791	0.2184500953273667
0.4206630627046523	0.1410577293986816	0.3578978884163608
0.3444164879580753	0.6384052481635910	0.6488292121747430
0.1046067127184393	0.9170065261154936	0.6202060944180077
0.4046488056445507	0.4026669996906288	0.3420773679112765
0.5137886376988980	0.9849667294041099	0.4056252281961370
0.1933084783513917	0.3027217558763265	0.0919907060851417
0.0594846368345536	0.2899812976825519	0.8154494131476654
0.5568362354400465	0.3175512834021413	0.8911011877261722
0.4867968435423819	0.3433835022747387	0.0977819236636035
0.3162567897639478	0.4805350671098998	0.1504520049901886
0.2345060242509605	0.0440547269728562	0.6581373652183315
0.4648982572696178	0.8996889160941528	0.1957335396861062
0.8058766153515031	0.3505659828180687	0.3419093191879441
0.8128089164591251	0.2940374282731545	0.1096972909754458
0.0701319314517139	0.1446921208212389	0.0236015389288715
0.7219219531604353	0.6383818583689441	0.2190759604911503
0.9589505089871442	0.3917785086353688	0.2239406319070040
0.9283007671986944	0.6609435983191625	0.2255340447948473
0.5750125584419534	0.5386392886222042	0.4921048653787157
0.6693981314138210	0.3100814365190109	0.7368836075860485
0.9207677536451764	0.6352004089139465	0.8559504374951217
0.1100194654860262	0.7402814381386730	0.5140413857247585
0.1703937962462145	0.5763228534206951	0.6301391826894579
0.3642643917197573	0.8944253356840939	0.4183622808973239
0.1831222967871489	0.5519106851854904	0.2140095920612361
0.6546253941628393	0.3489501289178024	0.0012926642281957
0.5310158385760472	0.7034860721914631	0.7124299928445643
0.8092073679855214	0.6665996261702559	0.0477063505186472
0.0388028320348032	0.4975792491357837	0.5746026130461650
0.7905194034355234	0.7604743860644627	0.6152496729462389
0.2453294621403872	0.7651167937823498	0.6136561118712520
0.6001313424431114	0.0489150666176465	0.9781011320647713
0.9557907959078238	0.2572481878242118	0.6640535829489471
0.0396857268056590	0.8689055301234105	0.1079234002253960
0.5012747436184322	0.4733877499851848	0.2029625631321018
0.9783556082679608	0.5116875869962373	0.3236114152240840
0.9249637632190962	0.4304416963259535	0.7989878992915624
0.8711485771883249	0.7928978797674211	0.1487118648212661
0.2692120063875957	0.0973014921763885	0.4665849769325452
0.1090606675859120	0.9148154600216867	0.8039921331609865
0.7622502637644376	0.8001108337354776	0.2762991907903411
0.1487692879182881	0.9986515117131616	0.9706734508691474
0.9675079613134671	0.0401457090289815	0.1161047471898135
0.6742971429173720	0.6930645283189906	0.7762841417276911
0.3278244970345665	0.5909076128721379	0.3087008198284053
0.2520536757404719	0.1255483086845226	0.0518298524708154
0.1394088501022127	0.8389154559419454	0.3990347317980139
0.4160476428640244	0.0452177435108805	0.7297541829822275
0.0988734938575834	0.1326137298241540	0.5886049153427569
0.5876280214687164	0.7244799240917080	0.5554107861861058
0.7143815841922387	0.1873055384361622	0.8674212865731105
0.4049157188168782	0.7820014167522461	0.7427711316979926
0.9622151355095552	0.8130370320688425	0.6670048604302061
0.8922149408459598	0.1750314055459360	0.9662552037610240
0.8867178710557794	0.2099737691046682	0.2371377220724311
0.8390369798636186	0.8087585251164272	0.4471050945169910
0.1864064920188439	0.3753020745159212	0.7287861666062877
0.9031600398889548	0.8449630599323367	0.0011541826179733
0.3279955021320252	0.9908903533088045	0.0836471274183093
0.7166793779036297	0.9550448871948719	0.8882410940612803
0.1738049625276535	0.0103345812826992	0.1651729018488016
0.0586716144180165	0.6105116023718982	0.4528577061933020

0.1693147641380414	0.8356581471831870	0.0048228228936263
0.7603888917526546	0.4451543701555877	0.7552836640924954
0.3465639728257340	0.8666506684863846	0.9570356708675365
0.6772397058555154	0.6172612396259156	0.9677110000230004
0.8843542080135168	0.1271404747811912	0.3985326777477017
0.3957636954965235	0.4033943087319948	0.9332832115447899
0.9989186711648470	0.9799457014897898	0.9270647850497253
0.3731698846280578	0.7759743261648621	0.2858045414437632
0.6610254199366030	0.3812330194320060	0.2017276240993877
0.4807220461528015	0.1837256036021848	0.9694704496738591
0.7256853998379408	0.6090836150816198	0.5513131430445769
0.6019537651703384	0.0291971087070012	0.7599721989700181
0.5920853880985869	0.8392138181108980	0.8112928539029814
0.0765176130837086	0.5803265456811952	0.9077587625963121
0.1679346149978747	0.6773451224004706	0.3348365829275841
0.5591756656321082	0.4348794999773770	0.7377914274147123
0.1994176109816999	0.6474691672109291	0.8053571185685507
0.6210950496322826	0.3196321550198558	0.3691629877840366
0.7323711380528179	0.8976860547908365	0.6892833965361322
0.7765607192189232	0.2043088230277051	0.5079457748534978
0.4414607002105705	0.6614003828827861	0.4919605717266771
0.1580823747709990	0.4844887661367455	0.0176811148404603
0.8306122031814399	0.0086886411886919	0.0052930065149079
0.7697724859290821	0.7421902935366310	0.9049164241964784
0.2845566504687271	0.7275037650175439	0.4496885911169169
0.0273258503574484	0.6418775304781669	0.7232338516425688
0.3208605207449053	0.2585031047095223	0.8340781520632633
0.2729839474136644	0.6886301590998062	0.1727668014154931
0.2321742707644741	0.9094827159345695	0.2847954457826606
0.0815171278418937	0.4125711204451455	0.4194325568079417
0.7884550339452083	0.4919961945767463	0.1749681300130561
0.2502387249477033	0.9174589066142007	0.5310310627192913
0.9987962831157737	0.6878509630327997	0.0378661557843716
0.0679732381900958	0.3333606947049774	0.5887952881713658
0.4005075772581584	0.7597251561184173	0.0718326869365853
0.0231301319640461	0.0265901843512055	0.4809564358036718
0.8439133383399461	0.9460337996197388	0.3293113055232997
0.7015656393620848	0.1579518916969438	0.0626843390158935
0.4410620529811462	0.2091837997624457	0.6737916807972073
0.1522197786505055	0.2421625463625853	0.4787689626169417
0.6576101189343466	0.5575050849683145	0.6986884028759268
0.4987804835280474	0.5767529396597613	0.3289475512735894
0.5214503781299987	0.0870586589372353	0.1045494459454926
0.8328371110116191	0.9591822515935844	0.5009908997565709
0.0331252412264457	0.5566556474537830	0.1368044313072097
0.7879285154778078	0.5252548876537033	0.4255980876710708
0.1744984683802539	0.2882531357156847	0.9284511684714909
0.3282238273230746	0.1199753215365682	0.9005468937756020
0.9778711596415991	0.2781606064293378	0.3672376729430083
0.1091685241168738	0.4082111757985140	0.1992248164984801
0.8712870197624791	0.8541778380641966	0.7975724111320706
0.7506066034791542	0.1011135522795952	0.6812093920526947
0.6268976039519616	0.7973840105980885	0.9634839887336607
0.5022680077453652	0.9143185577871598	0.6532885201031237
0.3076501436642007	0.8982468339603145	0.7357246636826561
0.5428012536248183	0.4894032158260442	0.9502498916519525
0.3002583215183558	0.4831188299199703	0.7545664389119140
0.1725135062109217	0.2910387076842317	0.2910194099970330
0.8992197236698315	0.9704921352698620	0.6495956264624965
0.2991039428188191	0.6705969431933124	0.9809133803700554
0.6251655737525919	0.1714226018690181	0.6167828508264600
0.9851692022101002	0.0371281927309356	0.3059675001967639
0.4908430720809010	0.2647887162466678	0.2796268041823907
0.3694413527875025	0.6174092318469588	0.8304857265102096
0.2609858845034720	0.8475712278316295	0.1419143733436724
0.4734994874888293	0.7622744087395775	0.8948425588592189
0.9041938660358877	0.5430008007681467	0.0020934882250098
0.8690643686566840	0.0452149781809665	0.8325105958673454
0.7659063438794348	0.5265879336946092	0.8808970317591696
0.7282573097917533	0.2008232760533019	0.2560629397144167
0.8558461441656849	0.5021246392168760	0.6013587997776334
0.4437307102397083	0.1850908218905019	0.5181569129509254
0.6636296572669249	0.8756056766059180	0.5124193145344886
0.4702149738586474	0.5348089525017267	0.6327135105343143
0.1481789373970485	0.6674704239923447	0.0536715318646735
0.9446447218772855	0.6925872499420992	0.5553885804476675
0.4680047949836110	0.3351945171707539	0.4567160698460792

0.6064984952823637	0.0117249102949273	0.5418164644688219
0.5273197154032915	0.6052226168327063	0.8496338830409023
0.7839115722655046	0.0288956530182825	0.1926846663343068
0.0266999507424617	0.0468680672287531	0.7163914639348641
0.9786434762359714	0.8676358210092163	0.5069484035322830
0.5870939365810304	0.2233473279874871	0.1488712317300724
0.2081946608322613	0.1349848509165856	0.2983301006084159
0.8189069294060736	0.3630403594025328	0.9386616344723513
0.4381466614457842	0.9969920142724575	0.8832000636338047
0.6029804778880220	0.1025339907444699	0.2761058261550798
0.5868017555565401	0.3057381727231939	0.5765396839775353
0.5246489623528879	0.9101522638541808	0.0381589895193419
0.2485996001381501	0.4009079382411070	0.5434519640881887
0.2446473096447324	0.7938310716378640	0.8578896805736524
0.0705485666773179	0.4847337574730830	0.7562291696395952
0.2334522175576591	0.4559533915601457	0.8971263919250598
0.7046467248739079	0.7007119391930567	0.4140238167670083
0.4875692176908092	0.8527227972800527	0.5154771981451404
0.1874525617148775	0.1180697134075038	0.8128856504552073
0.6523945185332267	0.5031130338551540	0.3266793182180571
0.3420075551397125	0.2628143181572098	0.0572504272911185
0.9136941558150553	0.3629947458123527	0.4840227246719942
0.8052975587267827	0.3327706553953327	0.6320145509744313
0.0299054137676933	0.7745992127545485	0.8799125025355973
0.7261656738100025	0.8992334252131918	0.0833086067689467
0.0137931746380852	0.1496879811341809	0.8533453685741955
0.4236960630806042	0.3783379118251037	0.7694883661364812
0.8832852596745874	0.6527029920943445	0.3998102521303378
0.3152827965629000	0.2629074491276795	0.4181710681953044
0.5924423679602030	0.8235712988652624	0.3672930253293745
0.0794800319719786	0.7557307605786483	0.2148665895259186
0.9756078775771081	0.8745592087330581	0.2687315149393285
0.3812619040833612	0.1523985806307324	0.1825196997951326
0.5290883447430867	0.6800172577520280	0.1870941997066804
0.4117394789750024	0.3520831942899984	0.6029305342490717
0.7301762541951690	0.0523962853099166	0.3958724685051830
0.6359650217841573	0.5126335130553915	0.0910311606732318
0.5440506903300915	0.6730183128521405	0.0263127253263089
0.9267242739078864	0.4096552715629261	0.0853360907461084
0.9860805054397049	0.7736988593070799	0.3845214379084777
0.2566034461563330	0.9745221226052285	0.8672671430086137

Atomic coordinates for Fig. S27

Ga	Cu	
1.0000000000000000		
15.7099996948240008	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	15.7099996948240008	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	15.7099996948240008
Ga	Cu	
196	4	
Direct		
0.3953355397267814	0.0632531392158684	0.2992572521916390
0.2449337135658874	0.6639636429202016	0.3238836213646345
0.6304180795122615	0.1116519074446771	0.2445448618309760
0.6044911031427055	0.5739421897082984	0.3334824976090385
0.1804648033316002	0.5788339753906755	0.9302420970824340
0.9901402488512756	0.0781315177544264	0.3660877014249755
0.9612986432455241	0.9647943153495337	0.2322988199926273
0.1911688008881104	0.8444242521859121	0.0288210895270899
0.7951219042505793	0.8107541643973021	0.2955340518907316
0.5177017140545085	0.8680079653273084	0.7413731485299516
0.7476712855003976	0.0675415562906277	0.4994107851898752
0.3182316605634214	0.1488049905429217	0.8435547792888151
0.6789132526463781	0.3913064493558857	0.4415219205564607
0.0472334447415931	0.3763395062723726	0.2354884941414408
0.1042667366383768	0.8409173618756076	0.2052060241019469
0.3891225582143379	0.4234414938803691	0.9856211851015610
0.9184112684559820	0.5179494802773827	0.2763717250689314
0.0578504373518057	0.6544461696877076	0.3652017980515053
0.1066533462672356	0.7713790307171494	0.6841896101764104
0.0520951146138716	0.2252618868152591	0.6290090263827245
0.9762819487296345	0.6752562174407346	0.0633128263355184
0.9072068053775144	0.4354511568012784	0.9026383455706780

0.3887811982027365	0.8921599881664293	0.6454906899438655
0.8663437772851690	0.4038674838257347	0.4806060702103546
0.9542428948834508	0.7362100147900554	0.2676516547103173
0.9801306482647242	0.7661584584885798	0.9207532734721112
0.3302647828304076	0.0964199807003456	0.0418566322039939
0.5169139218984790	0.3999993081498855	0.1006601896478996
0.4874704234383391	0.0766646583231210	0.1572962798071250
0.6945110758583328	0.1338113800364701	0.9075593137057469
0.3846311243445220	0.7008423711437475	0.6273201393873197
0.6058378989041157	0.2546423220316159	0.7447037535525248
0.0486190055602287	0.4740278203735750	0.7884686446229907
0.0111454200406776	0.5180848852940405	0.1314910679993227
0.8162250867461811	0.2427789218708738	0.0275454434511418
0.0122463132875820	0.6509859333840533	0.8064607439313020
0.1415429627565736	0.7538418373398690	0.8575456721724876
0.6141133454101153	0.8008450508667457	0.3923675771175125
0.7333985102709552	0.9497782215308260	0.2192163042374468
0.6068863878903653	0.1100199463493135	0.4076584806851215
0.2753937667878034	0.7445292059595001	0.7485090585762665
0.1555207334663779	0.0917252526195642	0.6244449456159569
0.8182690227774605	0.6607150961964422	0.8205276444486120
0.7643947566535508	0.5251674507475145	0.5375396697853860
0.0397594611420475	0.6009935622461856	0.6473517209190970
0.6968212306726881	0.4686735514802351	0.6992078269968844
0.5040955408317549	0.1277730649780733	0.9939887956398541
0.3400494612494593	0.8664811250178660	0.8420887519657895
0.9419930708134951	0.3455774603446948	0.0920911609707712
0.3563445029474875	0.8144509526136553	0.4821532237047348
0.9415155745941951	0.0699287536145936	0.5298391829377326
0.1543464621459978	0.1791618487934918	0.9652846489463628
0.8322989935327826	0.4771929664114475	0.0988142311749022
0.2580658032050371	0.2710011115735462	0.5290873083491521
0.3982495725451977	0.5669138206693467	0.0670499907229423
0.5442629119589242	0.9131145060519340	0.0697528107515875
0.9510251599555345	0.8217306232009786	0.6772923510859424
0.2326131350468031	0.1494547035509809	0.3573283247828115
0.6745934641977160	0.4916325337427406	0.0644217407961020
0.8954820476134367	0.7435612866557918	0.4346606635822452
0.0138336534855524	0.9451198901935319	0.8110721721086001
0.5296227223823234	0.1107101074140829	0.8094681441864232
0.5566660407727014	0.4839084357633069	0.4778570939302661
0.0537424760537048	0.7636209007329497	0.5231841459665199
0.7970279381136616	0.9559792457858626	0.6172038033465255
0.0071849376905838	0.5480008357181467	0.9555396421091612
0.6325530549471334	0.7260580470233802	0.0939277063626859
0.3574020486380265	0.5888251028179031	0.4604717787191561
0.6189667489657706	0.3810740936341572	0.8561871306228465
0.4152081353526516	0.4742410236766845	0.2330703818637973
0.2250644714535025	0.3256514633052711	0.2905394013919730
0.4974146003851949	0.6918477143389387	0.4386163925992746
0.3226522432962264	0.1848374909303188	0.2068615486710919
0.3794592556875986	0.5399639284063009	0.6220525974200150
0.1024062525007835	0.2804378952002828	0.3946077598145712
0.2569818824160499	0.9571756754418717	0.1214816472956711
0.6184249181635364	0.3504021361390728	0.6078024416927204
0.1493793397660648	0.3885835583039329	0.5077496587031539
0.8361725914724334	0.9697657655924086	0.3788535671799647
0.4167920484811254	0.2683433041325121	0.0746308947202694
0.3073497865455668	0.4211757224682636	0.4322427812109221
0.8732506308399521	0.1896394360993763	0.6634412046752272
0.1169936529390953	0.6369150336299887	0.2025095277102300
0.2371146976466000	0.5028522458107338	0.0790087385317222
0.2631908447783578	0.4614622049510330	0.8397212419273554
0.5733868982220860	0.8347058750870119	0.2081422287854780
0.8049895057471419	0.3233775248926626	0.1904014103104621
0.7432844935221303	0.2398140852352352	0.5679009751555406
0.1700456156797372	0.0851529971368077	0.8164804969467035
0.3531537557378543	0.2562669119075506	0.4058861118990065
0.2173369950238341	0.8765063182308537	0.6127768625087393
0.9361003705645272	0.5647855460851364	0.4943856974623851
0.1821592763704727	0.6069378608508055	0.7687242890572400
0.5225384423621949	0.5121407895552558	0.9566741391226141
0.2813509553607493	0.0062305725107713	0.4839764945977801
0.4793227115259535	0.2591414328599165	0.8849248364846257
0.3003576474013308	0.3792049806230642	0.1578624589283555
0.4249136745577553	0.6499735091587633	0.2765929446388845
0.4685447891281682	0.3593999654872966	0.3461766712021425

0.5790598413089758	0.5828744610211548	0.8076777759103435
0.3396339160676609	0.6924878590934815	0.9281116128328243
0.5726706747802901	0.9198772878004600	0.9066745104255303
0.1758100948075357	0.9118741732860146	0.8004897231833299
0.2663237896306395	0.8099598933113684	0.2187424533161740
0.5996575916859578	0.2880183582150592	0.9928152584832826
0.5970097168324312	0.4142518677831163	0.2571884439442652
0.8763533150460003	0.9913596710821612	0.9093752420503863
0.9085540939141337	0.8977471307741746	0.5133839824657568
0.4516948899947104	0.1290460134689800	0.4416209867798945
0.9792161776055247	0.4264928503396441	0.6134684882115256
0.4914064682726323	0.2216821741282393	0.2589995086890587
0.1405903548039878	0.2897728654786677	0.0953355066801832
0.2869467432420313	0.3164056315584672	0.9171755560578274
0.0196768846415359	0.0909572535549516	0.9464837322747657
0.1783709828153385	0.0148026512740859	0.2804368924796654
0.4394308083230953	0.3993520044163685	0.7903639879670495
0.5159836356229746	0.7480447410488253	0.9609490623658321
0.9536249018069651	0.2624380037578630	0.5047438588132365
0.3557010268941929	0.8471931600802172	0.0098014921795581
0.8379976476314190	0.1882669754013516	0.4102170090479607
0.5802717207067777	0.2642808122652264	0.4591118055615466
0.6833554315409490	0.6632951390539135	0.4867852430309724
0.4108219180315032	0.9852052612720085	0.9441072975569142
0.5543187194072229	0.6618322446979251	0.6149003732444488
0.0269722500387454	0.9615573412037147	0.6402793653994788
0.2685862126226042	0.6575880967114457	0.1444302609732075
0.8101808531635942	0.8257695459064147	0.7762317088285966
0.8776415296418422	0.6734658582091851	0.6165241254925578
0.9044576461730182	0.3426635718360524	0.3405181515895415
0.1935953083476927	0.2750801730367574	0.7349402491434623
0.3131031284840606	0.0395283369076994	0.7035660745370651
0.9423650217253251	0.1431267888699952	0.1060432971978145
0.1233571686057219	0.9503635287107555	0.5100952815817653
0.1107501365923442	0.1825333023409136	0.2184150548262755
0.7436416359707536	0.5197253730482566	0.8603756755511032
0.9146501963083387	0.8370498693127043	0.1332125220883011
0.7234169679881911	0.2396536089892195	0.3075021747555388
0.4382917091295122	0.3945052945474731	0.5504269131926161
0.8127341783235187	0.3698689781327058	0.6420186733564893
0.2162386700087578	0.6713083073747468	0.5654003507655133
0.4559574667569376	0.7142315645426606	0.7902833245417471
0.7692803194192620	0.3316519378789578	0.8091625719285751
0.6715326044312526	0.8674888232074700	0.6943597899507444
0.1172339317211147	0.3301781822546733	0.8577644164599902
0.8254367973745929	0.0869542809416633	0.2504896761353009
0.9573793590405812	0.2163569763758475	0.2599875756824329
0.7126597761914857	0.6589183717969646	0.6796266541785070
0.1714749483241058	0.4820303019274954	0.2733413827739152
0.7726813334799894	0.4427573310805778	0.3022592552333678
0.2961027938107909	0.9129127162498458	0.3576234078933236
0.4435605388593529	0.8265605843046405	0.3348596815512456
0.7615275094147576	0.8273633620776510	0.0970236314530588
0.6707661269951458	0.7069440582355999	0.2528627024777276
0.2059641204712340	0.9949306380384286	0.9578185912124618
0.6597328602589233	0.0982489947346141	0.6409325443089623
0.1067729091144163	0.1425302520952228	0.4742305070303825
0.5771905234446366	0.9595860124293940	0.3211447942682399
0.7943816660092583	0.6082679490041135	0.3591560880156472
0.0703298585629923	0.9157959850949704	0.3571084119485535
0.9969559504385880	0.1034134302333592	0.7512763396359534
0.4201723063634397	0.9349830103352645	0.1862833796683803
0.1640284855682158	0.4825521563010502	0.6508512866444089
0.7564344486687601	0.3746010173011347	0.9642444056393846
0.9359198738995488	0.3309396538837132	0.7513059248727673
0.5606632893756054	0.8063467486339920	0.5593244044670458
0.4225877169694288	0.7358169500133238	0.1257765367501880
0.8312591941342630	0.6710630510909142	0.1680203991424298
0.0736458330042882	0.0298380702671821	0.1170842679220997
0.8336485520707654	0.6036159517079599	0.9885365986548459
0.8110729133565723	0.8370522477794048	0.9441314411162325
0.5315807619832948	0.5122364995572125	0.6686200531520399
0.8843564859595507	0.5298834962922357	0.7108126503962515
0.6367054306033920	0.7481107972525841	0.8130652520525986
0.1756330656875505	0.7928492286715924	0.4050183750449051
0.9915158248027369	0.2534577005241106	0.9365278287906447
0.4994386501750400	0.2218367405497336	0.6086031818656632

0.8495448185803912	0.0137903671629205	0.1025287365118810
0.7520860150672557	0.8010389866122725	0.5339350261919892
0.2999350202233089	0.3961207304088654	0.6643220022226091
0.4650732434413237	0.9590951810468560	0.4985011503438335
0.7118935274687985	0.1186786170536893	0.0893205600453246
0.8645344951909995	0.1830601068128572	0.8656130426204118
0.1850964165507976	0.5549914954252447	0.4412134846107995
0.1053504292370082	0.4206560714084796	0.0050943277992926
0.6366859694336588	0.2648767243153423	0.1470175384533457
0.0406342479868891	0.4593395534305529	0.4044083144500339
0.4053524972551147	0.5589425312560011	0.8407483761869726
0.6437550322094731	0.6327178765047051	0.9589926164793197
0.6631140036740765	0.0006733736863557	0.8053736243664296
0.5014238358190957	0.0490047856019603	0.6416345064427169
0.8387514374410776	0.0274560922236187	0.7602677992974682
0.5430390910456250	0.5888686924379926	0.1502249831493718
0.1266048900691882	0.7055102887294399	0.0564900968412164
0.3414868040138974	0.2133987130981211	0.6871489415315253
0.0224751890156725	0.9040008959696303	0.0040484625432035
0.6955291715302147	0.9832050561503766	0.0017339197760047
0.3414963221399211	0.1265016209041427	0.5604770698269230
0.7349624520854284	0.1785529791187788	0.7547245460043814
0.4364067032467808	0.9845864060952345	0.7885591055692737
0.6134573548120973	0.9381418567269246	0.4907056792163842

Atomic coordinates for Fig. S30 reactants (0 eV)

Ga	Cu	N	H	
1.0000000000000000				
15.8199996948240003	0.0000000000000000			0.0000000000000000
0.0000000000000000	15.8199996948240003			0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999		
Ga	Cu	N	H	
196	4	2	6	
Direct				
0.8546238430230569	0.8566389263308340	0.4561809398835493		
0.4887549447790400	0.7814957370899213	0.4263240363874454		
0.9798114095755762	0.3101031853464430	0.2628430568386034		
0.7515231269709398	0.7913284298334552	0.6306461161410398		
0.5877209681828449	0.8231335841091736	0.6437375302652319		
0.6289750333790108	0.1622719692344406	0.4516548124095782		
0.7457124319944158	0.1707092903809171	0.6127439679125393		
0.6243610586208282	0.3469400129959074	0.4575332976874255		
0.3713541422312615	0.9220070502170488	0.4238744685007432		
0.3219170401574732	0.9814940634096865	0.6541154156335384		
0.4861304689047585	0.6692304980480077	0.6457314897941741		
0.1360095378702217	0.4515231696408907	0.6673223347611419		
0.2899269244274528	0.3335681450747329	0.4298596620050609		
0.9510085825674340	0.1415742271058360	0.6103324172966661		
0.2028210149174097	0.9317785832978479	0.4556302950607559		
0.6378982823186163	0.8614892803511529	0.3318478271998784		
0.7008332110421913	0.9714137818289204	0.6536978959673313		
0.1555617783049753	0.2244106924348204	0.4304905261654247		
0.2959154325864408	0.3427723193042516	0.3442578676729393		
0.9074282894287463	0.1595604833965616	0.3741109617976879		
0.8848881158210437	0.6148229410857059	0.2832450111673330		
0.6755019613247880	0.1931537012895722	0.3048874551702432		
0.8755741771310975	0.6861203814586935	0.4287967445716568		
0.0736209683593292	0.8290698689389906	0.2095275398639765		
0.3530287858776594	0.3676223274532531	0.5518608209541920		
0.2875606841042888	0.7007426946916500	0.6496560251012953		
0.8033910166746108	0.9296589676104724	0.2421473151348546		
0.1710667694020875	0.0752313020420837	0.3027433943707550		
0.9344574584928976	0.8104786641349071	0.3719388287706187		
0.0864123638626302	0.1544345970962880	0.6946341968506462		
0.4725480775749573	0.6653888151428037	0.4946610473194031		
0.8208313474913524	0.6463740134018245	0.5946810960834311		
0.1333301009408147	0.3746673521286324	0.2897623404685936		
0.6967479775367820	0.2158581099782956	0.5297579670293169		
0.6368197558094498	0.6310543075083669	0.3796985936353094		
0.1752553076524666	0.5188692769737890	0.5279260123282624		
0.3719131209247212	0.9394465482845192	0.2737878050960770		
-0.0040262808557455	0.5977904912783357	0.5692542955989091		
0.1330792700549965	0.8666924841069031	0.5245185222948036		

0.1661658977105697	0.7381800022326384	0.2711507379696230
0.2580859955094031	0.1763245548613194	0.5663366536697566
0.0637370137476213	0.9112409654539523	0.4068315330338113
0.1990910045501675	0.0072053904766693	0.5582804619783374
0.3986707470401534	0.3119960472586497	0.2775113441002411
0.6704034790368779	0.9271879058874717	0.5722034218381946
0.5710473964757440	0.2756141521701583	0.6381820759079069
0.6751052457461724	0.4475833908714810	0.3958778817169996
0.7423234426508133	0.3574590816405420	0.3051104423942196
0.0876143073324948	0.7774105871921508	0.6521550953189446
0.6043047246664101	0.5149563310769074	0.4923935709366854
0.2081669015508824	0.9104265897342404	0.2684605662841058
0.8474598375662290	0.2112583276365384	0.2984113978987266
0.7930673899619323	0.2440839356460859	0.4580489631187182
0.0050966526321297	0.7883677999257623	0.5739024456743983
0.6153073074932408	0.7606487275931941	0.5622829869041021
0.9697901555084899	0.9248980136110014	0.5167498550473009
0.4347178637426216	0.2191746069802875	0.5813892415276071
0.2299965793580110	0.5397443955752796	0.6047941382507448
0.1356432315347423	0.4374900550331863	0.4474205559035327
0.0626002946433161	0.2604524841826770	0.5723966331649512
0.7327274661997302	0.1506552757185136	0.3839854868377074
0.2449668732423874	0.6773208205971015	0.3363066503349829
0.2933576086989013	0.4925462535049145	0.3863035958191913
-0.0203448581484613	0.2811169104420890	0.4252097822832455
0.8789634848237682	0.4187269927088206	0.4434169963424578
0.0068578379215734	0.4671802317705657	0.3885997038145269
0.5729823131318884	0.0729176079214821	0.3558211970471335
0.5140478363838994	0.1736857833994292	0.2819362914139498
0.8738988753051141	0.5396148325905477	0.5067541148361959
0.5778312140807174	0.4591892751744555	0.6317203840104213
0.0255851370917756	-0.0111805043940012	0.3308398880779876
0.2340487831172870	0.2369694554344344	0.2796905648624158
0.3009941136039826	0.4877019771037543	0.4723501554707782
0.0708872818925230	0.5576097977528662	0.2819609001741777
0.0710510873627828	0.2200285580377659	0.3279863797795767
0.8837469390376123	0.2966916894612540	0.5960301235841672
0.4356648081742142	0.1311221789278779	0.6609353236851675
0.9904804933449316	0.9490584176232384	0.6055413952737151
0.5310211116438650	0.7293263089729751	0.3427779642964197
0.0750945445395318	0.1023383396347806	0.3866129845927001
0.2952007216644242	0.8543664861983999	0.3379549215763405
0.4371908484823049	0.7463959032939005	0.5725251547881260
0.4242569227565112	0.2112402632980934	0.3514023303976642
0.8852267793616542	0.2262760978161340	0.6789244595502016
0.8644362321960138	0.9178939645411069	0.6620685011691507
0.5470735672786443	0.9186134672471865	0.4871265889849033
0.4016900787809924	0.8252427318471105	0.4982766347035441
0.5591511843006820	0.6179836261309392	0.2834170406017114
0.4661385188169367	0.8877562692974955	0.3493075463162458
0.0798472677344012	0.0057733923891634	0.2376259562224155
0.8675205947713217	0.0382873339727615	0.3085649544131276
0.9982298813708752	0.7453122031439906	0.2948932914016573
0.8962855788382553	0.1062047936241145	0.4562356858107460
0.9461587756019004	0.0597107999420354	0.6828977793187264
0.8299024810780247	0.8371938404735111	0.5601783282730767
0.3000405681325375	0.8638241645535345	0.5760769036708026
0.2505208727500209	0.7482747598209425	0.4979416317223226
0.5054350350519334	0.8217792101378076	0.2665209430153098
0.2015339073767404	0.3683115369997784	0.5890040919218118
0.3265567647133099	0.2604611591261299	0.6436286247235705
0.4563847035412511	0.4801363398161574	0.2830090258105017
0.6722570713992265	0.8281392366076629	0.2520904732248072
0.7397434614953199	0.3182369104720844	0.6628714145461980
0.7017839033984222	0.3467516084079051	0.5817440140264523
0.8218194204155845	0.0204744166333205	0.5960957048049333
0.6087109589802676	0.2770361379471922	0.3790460119578677
0.9207719155591472	0.7566434725872500	0.6482945899707687
0.7579206431954658	0.5645263184039930	0.4427649912454266
0.7891779748791693	0.3191887463754746	0.3837894527975543
0.3325984604777205	0.9806339451199649	0.5060363865480245
0.8984205031656136	0.9783617885403096	0.3981119099160090
0.0932081851803582	0.6718392170896860	0.5117175339244399
0.5475232009843067	0.6018794920691821	0.5690042936979357
0.8098553900471652	-0.0097949919590032	0.5143029225479580
0.3694172132739527	0.6317139172459693	0.4303396140429050
0.3511085174498207	0.1110581288914573	0.2792358866765300

0.5258189155775863	0.2478834963991918	0.5110058193923144
-0.0429824634172248	0.9023708524793402	0.2692957852397394
0.6201311272988104	0.1237026195839392	0.6719911448966265
0.9093931322120777	0.3156322345215145	0.5151375970318353
0.8617139708168510	0.4625665471390891	0.5800843339924220
0.6212926677259225	0.6833478568380940	0.4571480897966196
0.3767509572156922	0.0498071792831960	0.5836782861875178
0.1755008329583595	0.7365610478575357	0.5798517390742411
0.3858326103636967	0.0378312819896934	0.3542262649982517
0.1431274638131039	0.5578171313614656	0.3657434381145538
0.4953616200696156	0.0488642477210981	0.4288707300500199
0.7366505004673775	0.6631910482989756	0.5189659114967097
0.0547611907530771	0.0383476662960273	0.4633273473296840
0.2018562694628491	0.1130915817135433	0.4918160784500539
0.0432408902389160	0.2127926216792923	0.4949264536548853
0.7267677045993397	0.0134588461136789	0.4434687091189135
0.1171940726398276	0.8414911245046366	0.3356693745584952
0.9403587347936028	0.3377874137952069	0.3456010543159407
0.6960127414699870	0.0289000749732082	0.2821882033268076
0.5307252224783668	0.0000033676570471	0.2799225307344533
0.7924962362613273	0.6787932467701668	0.3529573651463986
0.0236536898421379	0.7923462070438364	0.4636402947638760
0.0957243798270800	0.6102837057380451	0.6402921997833140
0.4664212929549803	0.2241499667091253	0.4290795091263659
0.1030435504746371	0.7265115283173842	0.3965467259624008
0.8466829331702707	0.5050401651453305	0.3684723875318752
0.5772560465422356	0.1243681391243795	0.5860019028880422
0.4270155215826513	0.5113540699475290	0.5254911183023789
0.2771264217574448	0.5071666193104390	0.2871426442795667
0.4502962725436649	0.3883530632685332	0.4618633507021236
0.6353568658213493	0.4698297325409078	0.2445014298415207
0.6569482808209699	0.6424615997571832	0.6374810345522662
0.4085860565545839	0.5290784833877730	0.6128035345903441
0.4568937565758008	0.3849051949615764	0.3735897048863510
0.1908740922933982	0.6136518405455971	0.4453907516227806
0.1313616057356868	0.3531086306284132	0.3736760756815771
0.2622363812986043	0.7790542207894050	0.4168043467921272
0.0071397638465804	0.5820785665290251	0.4515526361528811
0.7249500732180262	0.6754953544637063	0.2736459870168954
0.6392276007767270	0.0527793429316505	0.5180655216723258
0.3251233733033614	0.1054110862568808	0.4342602770892817
0.9095968377500483	0.4071595837576373	0.6637988793060879
0.4203570198102931	0.5814505524206818	0.3505094284579975
0.7122759399593390	0.5300599601770419	0.3195897089774244
0.9301634081919846	0.5758446411474201	0.6518075345328574
0.6981753817263322	0.5224855955988643	0.5646310778782334
0.8103567957744279	0.8354954467458527	0.3171488749679665
0.8833680145099637	0.4459059731691087	0.2836744804650857
0.0485624114267045	0.3031021282699610	0.6593083068149376
-0.0243331410222542	0.6344973581373715	0.3611152085442351
0.2182107680410004	-0.0123044310751330	0.3749756334428565
0.7429827133392447	-0.016924242470699339	0.3615169450708779
0.0366983731097986	0.4343114281968309	0.5946465223923987
0.5129463818055886	0.5297186294595468	0.4218469721548495
0.1172552211324268	0.0778651776603581	0.6203274650225492
0.3060642639838994	0.4234021669663196	0.6564480286474196
0.9053915878731397	0.7120529223022773	0.5141945004826655
0.3154024287937596	0.6347212731951831	0.5509595704495600
0.7218085139632321	0.7904904293551924	0.4074335432729205
0.4160688931096957	0.8429752768512438	0.6459941287306171
0.7486970524489759	0.4946620288768033	0.6479286724446894
0.7509682109116171	0.4001476685121155	0.5052886287532519
0.1875670313092059	0.3222674277338386	0.5082518296154814
0.1709102482158098	0.9157252181399969	0.6335491172203130
0.3862730655194146	0.7012490994690644	0.2840683123826396
0.8570443386210405	0.1517093850367167	0.5375887840781904
0.4888706421063546	0.9129121657211515	0.5651047499074847
0.8665345555277274	0.7615752386737769	0.2336811068982379
0.2483254276804344	0.1256897336842225	0.6794758177195097
0.0325553187359284	0.0762553487273898	0.5450427494355612
0.5994649200792452	0.9159680092229954	0.4088165292347299
0.5426564725952326	0.3906821903200168	0.5526938687052507
0.5228838420094533	0.9880907455174475	0.6373419698570507
0.0235086744312547	0.4396631341223468	0.5110814307977356
0.3472153256011699	0.2339884045988275	0.4956683547681467
0.2515022896950121	0.1714298237158778	0.3641200506347664
0.4649724206829857	0.0851701283233524	0.5121051884962228

0.6963068652079084	0.8338576491804303	0.4934269149643781
0.5662145285491471	0.3431077295820418	0.3048896620872279
-0.0046855316684754	0.1341448898360935	0.2661507081300918
0.4437076203659260	0.3673675467566505	0.6189744805710705
0.1761641880200061	0.2289343701970050	0.6256305664150217
0.3828103949707390	0.7348486247587432	0.3692194664712488
0.5618414276693624	0.4963453245377727	0.3458388322539497
0.3043492113265357	0.2843389556825119	0.7736220306573593
0.3741526949634836	0.2944636467967826	0.7759705023571433
0.6541937669873475	0.1805564402223327	0.8955702029754173
0.6556119522754403	0.1395465089774777	0.8839775968964469
0.3409272092564709	0.7372335192565818	0.8550984681515827
0.2934637724264464	0.7331288408479824	0.8548665189121377
0.7666955458607384	0.5877451217500511	0.8282230292155764
0.7637855159438369	0.6316543107633930	0.8194332832507857

Atomic coordinates for Fig. S30 step 1 (-1.47 eV)

Ga	Cu	N	H
1.0000000000000000			
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999	
Ga	Cu	N	H
196	4	2	6
Direct			
0.9498999285788619	0.9762252899678202	0.4885585575564502	
0.4578460661433913	0.6939266971014882	0.4124448743683558	
0.0045182424361238	0.5089439923809199	0.3509126762805572	
0.7709293100616829	0.7987790417968230	0.6214886688621177	
0.6217948701658550	0.8382699524601875	0.6611093803614936	
0.6703355806223260	0.1268037815952930	0.4912363785418622	
0.8263192137570211	0.2297068272299291	0.5842412124386697	
0.5194425187860560	0.5074068893377887	0.4916377448938133	
0.3752083347245377	0.9563766947890608	0.3877460611772522	
0.4551320244271350	0.8723329059105330	0.6262361183106391	
0.3385633853091228	0.5692809880598604	0.6548888318677288	
0.0660585756624277	0.5940228444432907	0.6406161368577857	
0.1514742629434976	0.2303836912487240	0.3687463144833014	
-0.0200073409790908	0.1146216165276230	0.5813072818622272	
0.0426422641988626	0.8913585487987767	0.4147421813126122	
0.5493795380663814	0.9669515588138348	0.3644037335733506	
0.7603334203188647	0.9691226790822361	0.6359315007305053	
0.0194777572924402	0.2126310426461400	0.4239940072875920	
0.2882211035462574	0.1774834756430458	0.3197708049162926	
0.7923640841454089	0.1259682886086643	0.3840964824535142	
0.8442440039863857	0.5775733172933311	0.3063615373256616	
0.8074624255676012	0.2740712638804082	0.3352500384509700	
0.8841212010670705	0.5114289893647206	0.4626929788743557	
0.8989495473500839	0.7660264939793515	0.2735257132742892	
0.3293498872665831	0.4262284303764992	0.5913555011665780	
0.3750560926407014	0.7354340680083506	0.6639773459470716	
0.6836175603700069	0.9841456834865621	0.2877669433186597	
0.3892046204646865	0.1107017099916943	0.2577350054571209	
0.9684076400842696	0.7296764042652929	0.4362178922481439	
0.1100175431629189	0.1438146418448862	0.6956404486138600	
0.4464849562491011	0.6681160575274944	0.4962543741296190	
0.7171754069719819	0.6338918022742658	0.6134656482014309	
0.2701561122902372	0.3488835482528984	0.3155571513286068	
0.7343686729943383	0.2756102207439666	0.5133612553810771	
0.5605689010996232	0.6680895597669285	0.3427175372245839	
0.2253038897853135	0.5820116534844656	0.5866225425153515	
0.3112896857407333	0.7744025114803198	0.2898576342357175	
0.8725996858876511	0.5718472554618628	0.5862777554058208	
0.0820516986315135	0.8142161757766433	0.4916267243271030	
0.1489681160682084	0.7042344535716729	0.2949445252405675	
0.3480592260564657	0.1290760705955548	0.5489075816479230	
0.9753614972868933	0.8114533896414223	0.3452941222895436	
0.2705343236301347	-0.0247986811544552	0.5807929769325056	
0.4995349757719209	0.2367339287000018	0.3097028038876823	
0.6083085157175878	0.8119013665740002	0.5777581380637843	
0.5393418674959226	0.2896893978197932	0.6547409315468128	
0.7321873699657815	0.5133021845348270	0.4198959911250115	
0.8878559787682238	0.6071811979304932	0.3888808140020715	

0.1243199893529387	0.9161804200422186	0.6411884902741809
0.7406392296868886	0.5844211307528669	0.5184569440071215
0.1745138985538479	0.8853808128767939	0.2766659284621539
0.9418082950858625	0.2696978919671153	0.2759768442112968
0.7486093027412655	0.3058046960354387	0.4183667330719716
0.9257437651257410	0.7574085134690220	0.5845608574986613
0.7554832746391733	0.7506181675556159	0.5390941716394081
0.9081416551209872	0.8222202156211004	0.5082624198366450
0.4477251339440665	0.2726800368343165	0.5748613716492119
0.2038031707572338	0.7166516767455361	0.6430276935151543
0.1496600919662751	0.4041583305987074	0.3720114036751624
0.0997195113422166	0.2492412266505790	0.5509968080594495
0.6407397884133658	0.2974111774692510	0.3483749389787008
0.1686190328171287	0.5070821529594810	0.3000417952400797
0.2994375265043236	0.3097364048702315	0.4010861143270233
-0.0082353903255665	0.3333340486943942	0.3564728497664820
0.9165619383081863	0.3522368765923425	0.4332922735440075
0.0438497196923440	0.4880929075953737	0.4298249351822873
0.6306328009009201	0.1717655443647427	0.4150455923492042
0.4407026579728550	0.0874394344675008	0.3406318327086630
0.8111027718771511	0.4314214147397351	0.5277240666134249
0.4576605408025748	0.4512228517616635	0.6539454186452006
0.0547297987522671	0.0064884368368556	0.3390030498453105
0.3712962988140657	0.2833240105004917	0.2558444913219208
0.3958395629091681	0.4489504640819819	0.4339709083120242
0.0018345703163731	0.6327035108319603	0.2836514741761573
0.9535282983975646	0.1620894352639262	0.3472574163093918
0.9712831729643623	0.3323417390812682	0.5925816710201088
0.5090355024288533	0.1346906056879550	0.6234532934816017
0.0872139618703338	0.9726755576780376	0.5579133652732875
0.6409347130562378	0.8344266304262191	0.3335662315943929
0.1331704388559649	0.0742392132288992	0.4086245905670040
0.1523458021848800	0.8289943610928172	0.3556195887661751
0.5845231396128867	0.6429298003156738	0.5527811645258029
0.4609845554574570	0.2245050842139439	0.3930554386274667
0.9732032203682355	0.3202285858606435	0.6775085202894178
0.0076700615918226	0.0363476362332654	0.6589264385798724
0.4936899665888161	0.8549312955261380	0.4249024440097367
0.4404804537869514	0.8101517441913294	0.5447865092200692
0.4301498935390887	0.6439503181607744	0.2851358436487595
0.4518759174598843	0.8112165938091687	0.3422139608094771
0.2307394077898538	0.0454263303057920	0.2622828402430182
0.8801605730630263	0.9753270317046689	0.3391535078461226
0.8443327247715732	0.9581215078547465	0.2556967106496901
0.8522769162060089	0.1919332386085579	0.4591493127493502
0.8551788305192873	0.1060509133322174	0.6447456958288070
0.9246922030799329	0.9418778825716980	0.5775058088165278
0.2896540525782385	0.8002598409954533	0.5838347084655053
0.3376331069500515	0.7806875360646848	0.4601685394775248
0.5573712468409654	0.7521931333372784	0.2639100406506800
0.2385614194782057	0.3422389723965470	0.5261757003906201
0.2633024897321506	0.2418341953136529	0.5924458261220948
0.6721147636928300	0.3835124901736954	0.2726815388151148
0.7050687304668503	0.6564143283894994	0.2822284228665284
0.8154546256428231	0.2707179805594755	0.6680139278720418
0.6546552421373304	0.2767680622439859	0.5891235133179180
0.7619897205182734	0.9330142833076525	0.5521017667092363
0.5628981549776251	0.3720059190204321	0.4102231095524421
0.9163318342575828	0.8849387031346719	0.6567307742588302
0.6219435712131861	0.6406013943186782	0.4633563736625955
0.8371273699713958	0.4333505407177975	0.3668650718162829
0.2492583620937547	0.8847792596598580	0.5117449665109772
0.9499674717278875	0.0448042171402236	0.4104933913536715
0.0620248714661783	0.6383530506260510	0.5621950712214130
0.3936498425593105	0.6560337139751722	0.5822814417555505
0.6012372464731409	0.9700754863806179	0.5280876991630774
0.3705791849513044	0.5671128482196286	0.3744285597418261
0.3621302951394150	0.9443672345421213	0.2981177506466090
0.5671827795888534	0.3687327891884664	0.5374372002847012
0.0051561068374851	0.9060155058355713	0.2753070175801997
0.6747976427934343	0.1642343793411509	0.6574742895045561
0.9197233248689852	0.2982643957691945	0.5174032429150804
0.8119331595907935	0.4052924633470975	0.6102789818356348
0.5858470672016973	0.7994256759991811	0.4951133957376564
0.3769432461800468	0.0361538647918326	0.6416008555281862
0.1056133283816896	0.8061944962124843	0.5739164015853508
0.3028500580888020	0.1240026044028726	0.3979252223232193

0.1926497965508644	0.5722686398582346	0.3815351413429698
0.4729786637316821	0.0817515207771176	0.4446629648587297
0.7933217468094124	0.6939102767249362	0.4481553120081099
0.1235516800473593	-0.0145974496354032	0.4763031396637913
0.1859168183690770	0.2330919742974993	0.4585693834555120
0.0688729100192113	0.3536683571139626	0.4817214025534996
0.7911565168651729	0.0234200613353906	0.4547807685692077
0.3042054922310493	0.7375659645600927	0.3739433360893077
0.1103838434420976	0.3253635760940977	0.2877987886338664
0.8033544081943952	0.1159178147022905	0.2942306163310066
0.5546963908171874	0.0895480063695836	0.2599849973127530
0.6507162445340183	0.7793743559339075	0.4112340636696473
0.0740036930362449	0.6187070445919812	0.4777304155046374
0.0377482222321458	0.7625420181043168	0.6509685964214510
0.5361269556057887	0.2611242125613925	0.4732166869839666
0.0555438465873062	0.6710536548346849	0.3682451107089946
0.7192617177856261	0.6408661480638093	0.3672441365614248
0.6914821932469487	0.1028998938453500	0.5758022986404364
0.3443665933852888	0.5358431644878522	0.5240717225560566
0.4979181487142868	0.3982593453788510	0.2730334053679860
0.3620470744137981	0.2181048134954792	0.4728013131233931
0.8357425890283550	0.4127456052554775	0.2825704504356558
0.6012744136008797	0.5330106221251951	0.6535947251326161
0.1907679518203899	0.4952435992067640	0.6622079311701204
0.4249492865823531	0.3807501025161393	0.3543195635549446
0.2891475494403059	0.6007145914283714	0.4519301025620053
0.1169640170761503	0.1535542656239343	0.2947276808858970
0.1680853825665278	0.7258057133563239	0.4293107748271173
0.1633074175721254	0.5028279612388071	0.5178177691571966
0.5830449334374067	0.5473732360911144	0.2665544296505746
0.5231083721368768	0.1408324182988452	0.5346183638038201
0.2997815326291515	0.0467231442094032	0.4708698475113594
0.9555468909166341	0.4709189605910933	0.6445440786574103
0.3519095708605325	0.4877229877672722	0.2892346611164979
0.6531400440265953	0.4757030909269964	0.3440204591383494
0.8798343086841653	0.6648039747874203	0.66714144484515538
0.6692463023791170	0.4739502213255548	0.5800262073620381
0.6280578462207307	0.1132336893417537	0.3405362812466026
0.0047368133813524	0.4611349481516472	0.2719349525128220
0.1795442817006981	0.3349189322197391	0.6646596435113254
0.8054388033545710	0.7792818158378312	0.3461029421926027
0.2252313889804041	0.9939426637818717	0.3461129269765994
0.7265466979659735	0.9593259071856919	0.3784612298482565
0.1297613759601929	0.4203328974462326	0.5892329264799746
0.5453010274727201	0.5429678492793720	0.4065236548553705
0.1831187449751536	0.1126749154892413	0.5223288525571473
0.2685588528629358	0.1433347573148306	0.6706129353454104
0.9154908128249137	0.6470130846229456	0.5127715948325386
0.2217951279275744	0.7013557730518816	0.5203706061111858
0.8666041915892123	0.8659658374493940	0.4127702412004660
0.5358228988802779	0.6903624739499284	0.6364808063416194
0.6802195659050885	0.3794892306143180	0.6632137444408230
0.6677379077538937	0.4148137236381780	0.4752807813563352
0.2214453359215106	0.4336021876033423	0.4477450064214050
0.2884830882201971	0.8889937256971511	0.6586405440230576
0.5216836907608493	0.9172838509858178	0.2759933424029219
0.8421109765278586	0.0892556203215120	0.5321961269379220
0.4467441772626085	0.9916662543821823	0.5624700074636869
0.7367223296219442	0.8188864842761872	0.2642107867337911
0.1583778962691684	0.0920756460051030	0.6079287981702602
0.0089602274596755	0.1389213404036391	0.4984346240146091
0.6143464549626092	-0.0214697202875834	0.4455136090387565
0.4937626549243194	0.5071814481704628	0.5786466456459290
0.5907452572988094	-0.0151466926168681	0.6179123565052693
0.9875146028275867	0.4722240626306661	0.5392458575797293
0.4012371204610177	0.3702543859689067	0.5073150609393224
0.2324840373395442	0.8978442294739405	0.4221787007598071
0.4211528027911250	-0.0666905410412932	0.4864753552556958
0.7455247216759561	0.8622404499245701	0.4727705107354125
0.6713849596916432	0.2141904694833129	0.2702719415726826
0.9691934621562847	0.0870716789909558	0.2669861507872221
0.3880150973721520	0.3145725658870911	0.6434350124851512
0.0605348030286413	0.2164376185928836	0.6234934058289890
0.2784668469315084	0.6220363134038068	0.3158885568031232
0.4962162240967277	0.5177597267626974	0.3321539166088385
0.0830473621321945	0.2631432068986376	0.6801575145643420
0.2784109846323004	0.2635045159433934	0.6528869742376816

0.9700646881463771	0.0990589637151397	0.7630922107005882
0.9508202871343405	0.1057979577822735	0.7840137610167246
0.0966456118474372	0.3063023554293674	0.8709136111980058
0.1099926779010944	0.3214084484389209	0.8502214974807787
0.6793273017842824	0.7121455522927574	0.7667080443990020
0.7034324440809782	0.7296303636616591	0.7488374352541703

Atomic coordinates for Fig. S30 step 2 (-1.77 eV)

Ga	Cu	N	H
1.0000000000000000			
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999	
Ga	Cu	N	H
196	4	2	6
Direct			
0.8669106639560876	0.9742172125448253	0.5128993974588506	
0.4754963619141461	0.7203191793151983	0.4099423872237552	
0.014665537936761	0.6000648035175897	0.3425276285719739	
0.8084123707796660	0.8060691611529608	0.6505699917369999	
0.6372354032354522	0.7773258277059935	0.6545128653167712	
0.5910303729964040	0.0286500725990096	0.4534862579533375	
0.8820519111200479	0.2195568571815735	0.5775952262337734	
0.5314948204531785	0.6170493754568952	0.5189089385583542	
0.2665637127511964	0.8912211112600537	0.4230674820769226	
0.4358580453879908	0.8949694888344807	0.6580336355762451	
0.4221603698010324	0.5327928726030876	0.6655953457557389	
0.0671740088564241	0.5634258074948335	0.6531199848350601	
0.1643665913479176	0.1864827737606785	0.4399118093412954	
0.0295707075592100	0.1394573086550566	0.5931853565804061	
0.10165171110821080	0.7969800182664206	0.4022758514385458	
0.4670192552564029	0.8652638415649788	0.3624275955029794	
0.7615018872214165	0.9695703565267777	0.6488100309468475	
0.0033681305446721	0.1405079872584893	0.4244116594602832	
0.3919681425101253	0.1505531615361221	0.3090260912048196	
0.7944680769587705	0.1320645704872320	0.3426080210578525	
0.8828776340265904	0.4693894056016177	0.3595590139073625	
0.8356162458979139	0.2381739868047708	0.2720929355578178	
0.8976733937574727	0.4663289159221793	0.4569684265717766	
0.9714158448254545	0.8499400668507360	0.2816654204421966	
0.3332872703145039	0.4513845563784639	0.5913512712860378	
0.3084819951231720	0.6773270729804279	0.6694871086751415	
0.7491446630635347	0.8750415160660294	0.2795793674672568	
0.4821167054189330	0.0038202689461598	0.2964715740760097	
0.8577023322522755	0.7790322833139307	0.4274488609158453	
0.0643427203648014	0.2173196076805129	0.6675846183379405	
0.39521237821204491	0.6062811561828939	0.4560784674883008	
0.7673575302986247	0.6282518659745661	0.6494766189169835	
0.2752951495081286	0.3178568221656043	0.3386038451554048	
0.7339523725177747	0.2260816881858150	0.5349370497218227	
0.5758355312392271	0.6133558908208254	0.3732588145329903	
0.2209580662299808	0.6609934019983413	0.5957499191977188	
0.2720622277044213	0.7391415240964340	0.2917615257470375	
0.8887483716780511	0.5183079691837645	0.5700711794522302	
0.1528379897870712	0.8888508152717216	0.4854682597879719	
0.1772053354085375	0.5864072624690169	0.2876145040716610	
0.3994751823108887	0.1624913863662844	0.5419179219160168	
0.0271494227014776	0.9174233453849583	0.3558061515828848	
0.3179544959563960	0.9498502706699118	0.5919051970289937	
0.6367462500659283	0.0756687969397738	0.3261372799498405	
0.7130993854597195	0.7320559980317032	0.5777990821928641	
0.6353486712331079	0.3690303019157126	0.6672252328126885	
0.7332370051002283	0.5029783819727534	0.4305653658069553	
0.9074485246860997	0.6179247683609135	0.4119807972007483	
0.1131161373769907	0.9152411967997011	0.6026409222949163	
0.7798517804424616	0.5672551098323233	0.5029047479728067	
0.1009348854733171	0.7453428276701418	0.3032469240266595	
0.9348964792409202	0.3755250273556907	0.2898143386105012	
0.6771671194124887	0.2136822455376711	0.4025663580214460	
0.8874839837218239	0.8149279307329066	0.5339710161369151	
0.8741045817929705	0.6820227953322766	0.5843346040756938	
0.9925038160838162	0.8243180507541711	0.4675975109580094	
0.4610225912951434	0.3153738465555072	0.5741436294575517	

0.0993123718324809	0.7434624075335495	0.6390303632983010
0.1068777468052744	0.2488610101452751	0.3613702742084999
0.0965315068117853	0.3502038436582885	0.5425395443011920
0.5567674298084967	0.2244781816895534	0.3419748556685407
0.2980335549814750	0.4642663811043001	0.2826372976288224
0.3997467351436494	0.2415312154852578	0.3904706462295189
0.0640755323781007	0.4256189044835376	0.3502120679937182
0.7940087318484875	0.3486725057570651	0.4082365574527945
0.0590978151199293	0.5343002134277285	0.4175636880746891
0.5013559304583807	0.0789821689618635	0.3803254543977144
0.3451610026691954	0.9926169882691304	0.3599710347604197
0.7528151847217294	0.4069430920230908	0.5290140215688703
0.5389282299928205	0.4624875507960980	0.6100113635824954
0.9807412752189978	0.1026028646052796	0.3481132868823814
0.3266717861729162	0.3019079236405949	0.2552772271021522
0.2389334098708217	0.5388781412480440	0.4396099146498226
0.9566438272683970	0.6694340326061970	0.2643855056150739
0.9072197386398262	0.2608996972372883	0.3540243260985106
0.9023306739326711	0.3669439351382858	0.6138943504383948
0.5449551205456362	0.2331853392889454	0.6416489475277913
0.0954144634198410	0.0165109061383838	0.5371625507578622
0.6497412236248361	0.7331612110900837	0.3278781637237392
0.1358806566396198	0.0120123791246130	0.4131381763400587
0.2167512283552221	0.8724292004186964	0.3440554241883759
0.5444908093548763	0.7299880109370095	0.5811507144811053
0.5384064094905689	0.3390176524436780	0.4030439931597815
0.0604515990182382	0.3970043053498850	0.6239934620208074
0.8739781704703473	0.0917272813883587	0.6418904387956349
0.3450866793364303	0.8738206185853105	0.5011187587203467
0.4817476310730079	0.8871459286759428	0.5656817131963352
0.4547286914243632	0.7036669275650417	0.3199764297189195
0.3818993119739345	0.8641237061916306	0.2874720205683365
0.1345377147509201	0.9168624313468760	0.2726469451911152
0.8727272180108838	0.9837287787027320	0.3205326105050774
0.8773834861983821	0.9599906959507258	0.2341259169843172
0.8336832127788690	0.1322911415453329	0.4232117990271660
0.7744435845760059	0.0728704254942270	0.5717756863325019
0.9472048376239753	0.9876741476258138	0.5874538940196368
0.3652630975846852	0.7763098552274378	0.6007575062758399
0.2531618465444571	0.7267015814264753	0.4546021807578457
0.6892749946175177	0.7119589527494237	0.2447316349509946
0.2837279468616620	0.2960945916339067	0.5616537445680726
0.2708102539488755	0.1334932982487422	0.5931635935136164
0.5951890933582160	0.4004491499501388	0.2861324753407676
0.8184372534079400	0.7195380339199648	0.3058991649367175
0.9034772887285702	0.2415994876954049	0.6718101813287211
0.6421464772470662	0.3278077988512647	0.5821218167915778
0.7492225981349806	0.8978198218178731	0.5726866862296109
0.6046791481979761	0.1949726689164540	0.4762394707461656
0.9613190150928208	0.8291593084748911	0.6096739874875147
0.6363144636409596	0.6337857097864563	0.4573191629810741
0.7295740513861638	0.3098968944854498	0.3324351422696046
0.2642550565658195	0.0310204345162341	0.5245956616991706
0.8912088405394906	0.9629599653591259	0.4095577295313854
0.0265166285173861	0.5116530220620149	0.5127018012171679
0.3378491108975214	0.6855322287492257	0.5269129445557031
0.6172746180722705	0.0009868442992477	0.5419446763792131
0.3923613982410679	0.5193260542270794	0.3832507830961417
0.2811737450120787	0.0115004023496195	0.2796916809644848
0.5721969178886607	0.4431525990819458	0.5272020290663323
0.0143551391293104	0.0471859064164512	0.2680014362658759
0.7436191094824699	0.2334644244021514	0.6348887233060556
0.8435537500540466	0.2672322609664415	0.4757875485752460
0.8058257035003544	0.3782755300289468	0.6888660820478919
0.4760020976360476	0.7688338490210053	0.4897446309686735
0.3280438166745834	0.0353002085242818	0.6671681760720999
0.0641255724486431	0.7714165174565291	0.5418692543917700
0.2623204840634543	0.1439135811731406	0.3703059157100925
0.2229340282026826	0.4813894124004607	0.3607572572524047
0.4277924633955311	0.9557879304096497	0.4342664316503528
0.7568062900213604	0.7345851795982101	0.4929609068656020
0.0101049481744982	0.9927292355093681	0.4674847249061827
0.2511468686772598	0.4292293111296625	0.5096960685553197
0.9835463333673347	0.3466895262265681	0.4123287724075756
0.7437286624865118	0.0818341315649605	0.4884468501130621
0.3209842590705899	0.7457386008207044	0.3776875734419466
0.1389811384733354	0.3625357291768868	0.2796995682788182

0.7669524422905885	0.0791232806022487	0.2613927439432975
0.6251644132445159	0.9793753960064530	0.2538535808886110
0.6905838766321806	0.7534225627430603	0.4070825357909260
0.0856582396280722	0.6736295912215654	0.4636965837152874
0.0380014904756741	0.6224316720614621	0.5764078711685514
0.4804468746804553	0.3107193009468581	0.4915036121027989
0.9496206700762454	0.7553690501452593	0.3572115725949667
0.7696740458379734	0.6164438417763778	0.3661602148700751
0.6419591165698241	0.0940060055303703	0.6295144405991384
0.4090805874868750	0.4914333576205614	0.5184166190269228
0.4940048440120541	0.2616969089382921	0.2640172854841716
0.3028240665580628	0.2507247543544373	0.4817946183354143
0.8017163501326847	0.5307962135623142	0.2791885848271041
0.6020594546796856	0.5942983481492501	0.6497123033618942
0.2343693782871861	0.5267895901127679	0.6584317459726854
0.4364015786316535	0.3635727528068847	0.3273534369704130
0.1898697073478639	0.6004126796511299	0.5172679798045599
0.2117151340759497	0.1829639233031396	0.2862501875575107
0.1731823045191593	0.6512578044806624	0.3747537502643289
0.1144674141294921	0.4048997425523346	0.4616277273089197
0.6080095536726510	0.5762725521330854	0.2849990229211517
0.5702810138161184	0.1691272834668898	0.5580160550207184
0.4412998653369890	0.1475994083517133	0.4556371244162938
0.8984430014162104	0.5145978693863843	0.6621503757440934
0.4466616299289561	0.5375010951829061	0.2985750527543420
0.6892069332013430	0.4702100822150133	0.3506911267770227
0.9399217934370951	0.6928992866528224	0.6670330842871197
0.6695184223603292	0.5699463619327565	0.5656626700959643
0.6250137569898656	0.9052494735419746	0.3429712682769340
0.0265450091491205	0.5134729632626178	0.2701939990177146
0.2421151386127611	0.3662620471808605	0.6613706067328116
0.7938216804643448	0.8562171594752686	0.3598821771403097
0.1418283278150124	0.0473986886522106	0.3325626970758649
0.7151293997351098	0.0078886875613902	0.3949810233876830
0.1635249833320455	0.4940181045084658	0.5797229475721487
0.5414597578695023	0.4960532930893758	0.4385118043831777
0.1464211409527638	0.1785820526609463	0.5255989639892582
0.3810640295004188	0.1967750927788975	0.6480168422061326
0.9255772910200011	0.6535181259732186	0.4961115368799845
0.224427173228594	0.8228660517958982	0.5561018744043051
0.7453359441176428	0.9048556814044854	0.4624999704416208
0.4753347297064346	0.7121999548008430	0.6625178330635194
0.7456261300593652	0.4557572275937288	0.6150139135757907
0.6548734427023313	0.3594957583146908	0.4635455910096886
0.2312053382534180	0.3383161872050936	0.4152711471142269
0.2367992388081776	0.8585618558930251	0.6698930895917213
0.5534010416312033	0.8203974106799413	0.2696984720559508
0.9525915716906018	0.1267384690049299	0.5152761336476906
0.4681612820064390	0.0547837125065015	0.6074995078521203
0.8495899543975256	0.7822091521482470	0.2227879703116666
0.1609695670541725	0.0559999325691031	0.6417067493019174
0.0223690942550086	0.2627726305547079	0.4802780112735883
0.5738178441089800	0.8597394353260802	0.4333343145315163
0.4198645543401905	0.6055694661701357	0.5889414578908582
0.5940523284000996	0.9313422477656111	0.6269538077221544
0.9243784433354049	0.3686630399256624	0.5315186235423026
0.3786059146010354	0.3991906970054076	0.4431606165901578
0.2892838799077487	0.0672018641547822	0.4464651309077167
0.4521845703387241	0.0139235472396729	0.5127532929395757
0.6251254207319253	0.8332565978265526	0.5175355209138564
0.6549602291558327	0.2185440344901765	0.2687355274098448
0.0296210048000028	0.2170040723852403	0.2844748619859258
0.4318570183772852	0.3748884829555622	0.6455883620933134
0.1522563559857714	0.2435720264405234	0.5963013009731934
0.3130230706489254	0.6100505728347542	0.3336049871314435
0.5330106877186982	0.4679495114671056	0.3583172903651671
0.1361556361680621	0.3106574502265100	0.6486929854423259
0.3451182481309971	0.3040103125394543	0.6752185347734595
0.7929869717519632	0.5226693400331832	0.7578868564678451
0.7857173072563767	0.5517365646754306	0.7757958804605184
0.3558073919803840	0.3027205004446399	0.7062750296174362
0.1234537066299101	0.1312934965583724	0.6834773075178094
0.3195372636136488	0.8652023753429791	0.7672798935530761
0.3172532652515281	0.8578890565777859	0.7900418143300872

Atomic coordinates for Fig. S30 step 3 (-1.99 eV)

Ga	Cu	N	H
1.0000000000000000			
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999	

Ga	Cu	N	H
196	4	2	6

Direct

0.7135630082467167	0.8542865297372195	0.5158594699808885
0.5975404776153483	0.5434473606916613	0.4267147125758874
0.0472527229895392	0.4788159456738497	0.3570371812349390
0.7711633109544104	0.6259680981964777	0.6666991037515296
0.4287338081540384	0.6199393471017508	0.6636273509020700
0.5447168130223452	0.0612648885687548	0.4605176245484575
0.8591347048681253	0.2502681244810178	0.4973500649983058
0.5299709830284449	0.5905603128791523	0.5021506932670972
0.2755753112578453	0.8815688763017021	0.4512256826850979
0.5036813164785545	0.8527867934764423	0.6757067571464742
0.4429383361936969	0.4567402989746874	0.6667855186023139
0.9148446865421038	0.6510394762322181	0.6181769213077739
0.0016923260114247	0.3861122885545588	0.4210832630420264
0.0249728701406866	0.0516489364998117	0.6534065507874295
-0.0047711198450660	0.9144735007289392	0.4324494008883019
0.4573045320458559	0.9803532186015510	0.3532609634531603
0.5722701079226261	-0.0006561069038338	0.6486242240239980
0.8641360152612857	0.0732613746470550	0.5059674591601887
0.4034086607383385	0.0946336409700061	0.2918502649259284
0.7400254492739918	0.2262304310157961	0.3641720730318726
0.8828622036524232	0.5490179412777280	0.3592589755867722
0.7744741824807239	0.0229043517036262	0.2309233170525342
0.9278379030158305	0.5800471599621810	0.4448807357060563
0.1658195062720992	0.8045017667242679	0.2741886928122128
0.0798854584896213	0.3059271054374542	0.5826238972015074
0.2205088937800340	0.5417470243521777	0.6509211903371259
0.8457546193230258	0.9387799173513296	0.3038809256999986
0.5407749473608481	0.7893502375729501	0.2755138523763310
0.9003748402351666	0.7490543701035075	0.4256173636219480
0.1847227187537904	0.3823799898454714	0.6423601560087773
0.3563801342710341	0.6344430826482165	0.5181913099222039
0.6253507271294507	0.5698059252562693	0.6378943330782505
0.3109032577876211	0.4339350233797446	0.2802146360249784
0.5635060096422594	0.2424871562442451	0.5026589809515110
0.5834738980470342	0.5178878393190016	0.3477090702047729
0.1687374670349312	0.5514677941696327	0.5675372151345490
0.5581234432956549	-0.0067441981963001	0.2630869028771499
0.8876103800395867	0.5706775862475024	0.5282446384254293
0.0864298632557589	0.0440810139730710	0.4799414335681050
0.0013515322451925	0.6704934250479794	0.3609850703822615
0.1932972777783134	0.1675965436889259	0.5197047876181561
0.1033497116319043	0.8756437047633453	0.3450815984181461
0.2316180133623570	0.8738746281921540	0.5921043771111369
0.6182480371297515	0.8768144261235643	0.3413033614337245
0.5254315231571700	0.7318015607534578	0.5548133315976287
0.5908203667591410	0.4098817658500994	0.6430782541841022
0.74097504688874605	0.5540335634765355	0.4736406956482849
0.9329127895363265	0.8334510571086541	0.3568042754599451
0.1543911789361146	0.0218463278403333	0.7062064385357189
0.7152225035150215	0.3047804354194569	0.4440206321986895
0.2422806429705162	0.9630074166041699	0.2847872260295437
0.8909762936673040	0.3090345542172467	0.2730999954682886
0.7460607979979701	0.0377237305509821	0.4419467302010646
0.9677573936121514	0.9258080216733025	0.5190537460784943
0.7637238324769247	0.6082304314769907	0.5824902206463184
0.0933627865636427	0.7748591069059325	0.4152892792400266
0.5028262838724352	0.2037758550528586	0.5806737427577497
0.1948261454101647	0.7243426941223189	0.5490569228334933
0.2304928698737219	0.1427253440524370	0.2892357058307157
0.1006516813841411	0.3350521622332951	0.4984957978672143
0.6125761982201898	0.0223281837306917	0.3850676824295532
0.2753435304494354	0.6018065553992129	0.2812300633925733
0.3573650317221469	0.5241872528223326	0.3511616379854623
0.0742312720868645	0.2955169237659514	0.3551175213076380
0.8332075496233131	0.4394824079969504	0.4240201674971747

0.0978147881115561	0.5938787060757473	0.4187653629368369
0.5983451317799922	0.1929999527213926	0.4104369725364308
0.2814914634105800	0.0559787581195934	0.3607452842867464
0.5994435640217564	0.3465731387551165	0.5673398233994613
0.3374582496829452	0.4616418473034246	0.6008427357349664
0.1126737047671087	0.1217431782155728	0.3763408869167816
0.5314033576496595	0.2684050918568920	0.2669390639575009
0.3628775373378219	0.3747022301636656	0.3995744139119908
0.9560582730102988	0.7394240755886434	0.2857391708798835
0.9402482125873550	0.4064355567875474	0.4983374536452742
0.9922879347416744	0.2207638648130006	0.6505263369526044
0.4568672390514540	0.1458975887683255	0.6554888438147098
0.0871855263086256	0.9923930270023683	0.5695826691779881
0.7396536810616096	0.8248555015149908	0.3996926229437299
0.0474092090646452	0.2202749475216201	0.4379059879459170
0.1547135354577253	-0.0348039754318037	0.4090280572527784
0.6774594847133566	0.6844576844948757	0.5148726989981951
0.7060092183321799	0.4053850159722987	0.3687842767117686
0.0533011575971581	0.5661127701130190	0.6366835783654302
0.7584897027317552	0.0158919083497768	0.6440279928212495
0.4564689770093036	0.6348114633643848	0.3991083208858161
0.5672259638564379	0.0757323510572096	0.5393578836729640
0.1047424848717693	0.6485242519522356	0.2918244530557077
0.5959114662289419	0.7057930067099495	0.3585541931354366
0.0889849131623920	0.0484546147870500	0.3004841701149231
0.9671454821377469	0.0042922637550166	0.3565384612697487
0.9394035939395646	0.0542316196185900	0.2581445704895006
0.8776114146627109	0.2517359492122160	0.4156461177056087
0.9344410999926905	0.0876292350653759	0.5828039430669153
0.8244499406841511	0.7888254428199254	0.6540314857660925
0.4467516540089894	0.9653169570633583	0.5695797050258128
0.2035595846628464	0.7217969043444332	0.3539690339035594
0.7277892723125430	0.7015095297127423	0.2533652508956868
0.2303033468045838	0.2177637219366305	0.6015029987772015
0.2060995681144512	0.0496224117412125	0.6246481610433967
0.5937055950921052	0.4312597510703969	0.2713401227134319
0.8600942827324131	0.6030315396722089	0.2722031380082918
0.8242875792533418	0.1769075245691690	0.6319450800492312
0.6282802954477629	0.1563197600886627	0.6361697635542913
0.6350297129394779	0.9359526836768768	0.5781035100041541
0.3813450117349020	0.1523935939101498	0.5054279417798472
0.0878325713810480	0.8850651203537450	0.6549625554051284
0.6056843832285311	0.7316192782240766	0.4417525201726549
0.8830357838120763	0.3673036534717485	0.3505056027210722
0.0522469317738683	0.8243975926279381	0.5797059787320324
0.9421197901207822	0.1836445130933829	0.3451482292367776
0.2519583352726152	0.5165409146683684	0.4923891645555495
0.5318030293557832	0.8746993650013746	0.5134743069960764
0.2570958560456815	0.0079579614662413	0.5384675224162860
0.4440841565424989	0.6435651062099614	0.3106897332048241
0.2866992677562685	0.8830369259414553	0.3596430744223397
0.4747882195934509	0.5735540661418629	0.5826826459594312
0.0348811071624621	0.2104641938378350	0.2744546034836046
0.7131152978793027	0.3041211093029217	0.6448570389995183
0.7659670988005334	0.4045358937339701	0.5073216310084105
0.8633996030322368	0.4377784451869305	0.6567515808644848
0.4474288776994015	0.8014669410622446	0.3534995086822190
0.2611029527609204	0.9036967577986466	0.6736621822536490
0.1454201237433586	0.8806721148242282	0.5037782248144510
0.2586124358864903	0.2337199227083313	0.3632281914113868
0.2188701735277161	0.4034771470901177	0.3551826216106990
0.4339518539464624	0.2335979570498081	0.3587716653545107
0.8433847299156895	0.7325369329916442	0.5029192837821312
0.9149421536280227	0.9286526588460122	0.6337330172413699
0.3530313690539915	0.2823138720479583	0.5584196431522185
0.1763739638899453	0.4189541936005416	0.4338382706067401
0.7243277996477978	0.0968735226771408	0.5680270731763436
0.3298949420192810	0.7678266552645547	0.2890283806022451
0.1280841940623921	0.4798257483026509	0.2803285830306338
0.8112269875148241	0.1563288008263923	0.2901126186140298
0.4092826151429638	0.9162740455041759	0.2783384449347087
0.8328538543880433	0.9005763375688940	0.4618123354682626
0.2743046624082256	0.5837663742989849	0.4163611017216332
0.0307813645474634	0.6548180998405988	0.5562209909060387
0.4442106167367824	0.2508329507596221	0.4456467572617068
0.7564399855952469	0.6531815166173678	0.4096579516895161
0.7330550797866870	0.6165248654186969	0.3322278615325299

0.7451569412879515	0.2685262726043561	0.5629788268818199
0.3141906506197692	0.6435075526914370	0.5967410792830529
0.6478897691264711	0.1410427653893891	0.2496147720078782
0.3210017275438541	0.3521693789346634	0.4843544584935547
0.7080807644194781	0.2960679738343493	0.2863376897801111
0.3104795627615126	0.7419871403914271	0.6650462704926259
0.1445790756867262	0.7196113359158691	0.6358620298168027
0.5617548858457012	0.1354632981175234	0.3265781851491306
0.4460574558371191	0.4329920980903397	0.5306808419357230
0.3607470172593569	0.2685678369203835	0.2830128461679883
0.3264052859440532	0.7467656285253886	0.4111859142034922
0.2159406041631920	0.3902201784316895	0.5534785819504828
0.5924147668979578	0.6103978993167818	0.2758119767950878
0.3569702799427241	0.1034957334912928	0.5896781057609708
0.3937487594494745	0.9822193471249064	0.4871473581514106
0.8184851912510925	0.4458659552910440	0.5810329733804396
0.4646036596730408	0.3980820537197229	0.3270605218225623
0.7657828702007351	0.4611152483717168	0.2919649102051955
0.019483848270181	0.3933305900042881	0.6544508746910231
0.6378768327631495	0.5097180853039616	0.5578195900457400
0.8073874894139389	0.0692235431708978	0.3703661605554965
0.9566133240138011	0.4666112835629336	0.2830575370978357
0.3671256647317169	0.2818239354370521	0.6621229865693060
0.7781505607204178	0.7860396780802286	0.3234078254068816
0.4107206359372018	0.0958941039583083	0.4109928186261688
0.6304239937737155	0.9062941758008435	0.4481088482436299
0.0715400380763351	0.5301098721403544	0.4943404991618975
0.5434076336514647	0.3748616715872734	0.4076571038669177
0.0124519624980803	0.1844680307782537	0.5205548264603196
0.1571262410379949	0.1927108045205621	0.6824946737170952
0.0202424395532920	0.7580962881597523	0.4916633343458689
0.2044789204324198	0.7048446855757935	0.4693152689704638
0.9392482198502384	0.0837953067689959	0.4314988426367118
0.6718849969314532	0.8594020504315579	0.6566743540069485
0.5580276338154413	0.7209669008658982	0.6354501707446526
0.5954863724604638	0.4129401263150649	0.4855935529443252
0.2209676487743508	0.2416367351682603	0.4429180676485138
0.4108544320458700	0.8129949784798225	0.6057470157576312
0.6959078575548859	0.8748244942564158	0.2597636408920659
0.7072809464710370	0.1585806911895511	0.4915908306672125
0.3991776338840071	0.9819026083942826	0.6498830130193788
0.0170761577773720	0.8975852317270642	0.2696338976739886
0.8860616438438697	0.7963490689378515	0.5743274498058466
0.0021986896583240	0.4629953966345688	0.5726431232331143
0.4610041427891479	0.8882646829073430	0.4260221090325235
0.4461529333271726	0.7404908002234954	0.4726797792329469
0.6975318757761124	0.7623671567936069	0.5888335062933607
0.9118828289708180	0.2944023212377323	0.5790285961995456
0.4167548458560106	0.4991969130018832	0.4511948397530757
0.2560721035348934	0.0735912197891651	0.4497948352052251
0.3383126225701609	0.8277877669392246	0.5278214372020039
0.8158763350214391	0.9538792578022143	0.5635735173248566
0.6981497511284558	0.0247731636177144	0.3133215714962508
0.1793933334758144	0.3093803072169623	0.2847372083863701
0.4573767459722139	0.3521383181749187	0.6051426453333327
0.0901693309451674	0.1475503171001727	0.5891770874059007
0.1885830023146329	0.5618023845310313	0.3507919928222552
0.5926403925152851	0.2917901931235647	0.3440436671640298
0.2420195998995310	0.2742012269552358	0.6574197593088681
0.3868066161330668	0.3718362798684853	0.7065784537899490
0.3323785560486584	0.3943715618902261	0.7199187291171251
0.7940634704966806	0.3587687586570112	0.6743526760140497
0.4267214701895037	0.3530028845585745	0.7295045559398031
0.2492271522652322	0.5668816280305653	0.6966717419904416
0.8271017371843284	0.5271442925414616	0.6824568326764002
0.4809949876574844	0.8327875161349132	0.7222044278501694

Atomic coordinates for Fig. S30 products (-2.22 eV)

Ga	Cu	N	H
1.000000000000000			
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999	

Ga	Cu	N	H	
196	4	2	6	
Direct				
0.7023787239581436	0.8583725216405508	0.5159100153787909		
0.5238279217358739	0.4224529962278311	0.4359266420331435		
0.0745701748289359	0.2894527698186135	0.3720199706116536		
0.7452072565541601	0.7659743639996843	0.6564925586889671		
0.4257127465693143	0.5363116960161256	0.6621392476931318		
0.5385737117956506	0.0772526591901354	0.4361596707076414		
0.9531206615827402	0.3137425076597494	0.5627702692250174		
0.6453759260726765	0.5649359245099995	0.4503520704616404		
0.2215888507934417	0.7538855090186268	0.4306327774439208		
0.4537097580920676	0.7960511224441992	0.6478889528939259		
0.5977392846434240	0.4855805872577434	0.6844139425061194		
0.0058016187164278	0.7609744170214630	0.6547341473780526		
0.8697027620600960	0.3305461447497560	0.4823549359033875		
0.9748286819085022	0.0931601858591230	0.6606854926711226		
0.9422698028374177	0.0507763892991912	0.4642335485585297		
0.2879058368031246	0.0130961983964363	0.4383347589228930		
0.5681440447354008	0.9244080141910834	0.6516276004358185		
0.8336026034051115	0.9919547196971752	0.5241366851619927		
0.3189138322176416	0.1779897102976750	0.2985505110158520		
0.6502548272989461	0.1753370969167620	0.3842102013071232		
0.0455817203077371	0.4727278420417178	0.3548821572341657		
0.6680754750501069	0.0439466688835156	0.2825804053859625		
0.9477659575966344	0.5565021569529368	0.4166928617702345		
0.1885030562859244	0.8799460633059534	0.2970652479904946		
0.1237316710775193	0.3191289995907278	0.5448808445953627		
0.2308531643583528	0.5280775454817098	0.6583119146149892		
0.9028910946252797	0.9888675642170522	0.3545032645159542		
0.5857568166265329	0.8255476034934127	0.2764454817313255		
0.8969411346085382	0.7222383318849549	0.4190751102367370		
0.1380927351618114	0.3841851947562983	0.6296105495134012		
0.2504561558368628	0.6255358996563649	0.4943255601027703		
0.7055993058264841	0.5560237451879094	0.6340429891029952		
0.3888287810285288	0.4809382296386292	0.2974016197674963		
0.6187202508122237	0.2916409471756901	0.5209972624019419		
0.6666878553718451	0.5227921969627031	0.35047481411140027		
0.2292291617356309	0.5971035165192610	0.5805169137544086		
0.4969285682415677	0.9806632442386444	0.2913522252497835		
0.7504114915421469	0.6937100164544862	0.4921123396639794		
0.1106036640982134	0.9833614045418774	0.4394707647663510		
0.9959975400005475	0.6413338120071049	0.3468813737033487		
0.2765263898248636	0.2188100113210264	0.5487190809724228		
0.0187209837810661	0.9573669686839065	0.2815394716432884		
0.2363856772848960	0.7700501101722746	0.5609562270082616		
0.5314972628060004	0.8437605445861615	0.3538252819570564		
0.5967957751217263	0.6387629101614744	0.5259584394266991		
0.5922264882887897	0.3251822804384537	0.6770780534183426		
0.7922619867525473	0.4686635619124435	0.4025392829417264		
0.9383171630505420	0.8111736469947486	0.3509587218646547		
0.2126972230037323	0.0348044375763485	0.6266463982512861		
0.7215161568664021	0.2163673804660899	0.4562628116504108		
0.1665060565389724	0.0549132975216279	0.2828915450792757		
0.9234821800450281	0.3256865030031628	0.2546883094155610		
0.7712542690799128	0.0527892221916743	0.4128034711315141		
0.0222698859742439	0.9090037107915053	0.5071024082180672		
0.8882655477151368	0.5744618276154917	0.5607130205084154		
0.1096232856644279	0.7624902295441147	0.3644433733429932		
0.5585954845175545	0.2557960969277007	0.5987353266031175		
0.1129235384581271	0.7337323221695166	0.5049052579516251		
0.1437809880321328	0.2216929099858014	0.2982099744983686		
0.2148173496356991	0.1045279064028391	0.4951127970409935		
0.4281629085374752	0.9757917466103261	0.3815460209823278		
0.3310036613242883	0.6323953017319198	0.2637508299024255		
0.3796177688657819	0.4518212232907161	0.3843610479720292		
0.2492772366890213	0.2655337895024485	0.3661965598301649		
0.9722189500717574	0.3850213342299822	0.4192999756918457		
0.1561691896738406	0.5992113434741151	0.3851077903471704		
0.5394235659865451	0.2485163561234814	0.4455625542196866		
0.2065384807564948	0.0854801205193135	0.3703323644874410		
0.6331240042083988	0.4127098647903039	0.5908793460130951		
0.3428198189635231	0.3951092349369913	0.6629545457074161		
0.0371752993962920	0.0998262298451274	0.3448959317463149		
0.5853764623862696	0.3541697378354345	0.2589556282137824		
0.2219458965332134	0.2409338483457645	0.4475435082574390		
0.8867429590745534	0.6666358238335249	0.2716929434880211		

0.8251895796670079	0.5412955350471227	0.4774473050063541
0.9795622497503160	0.4084602135011499	0.6637759993304266
0.5060105425516781	0.0809435844430716	0.6404432475497071
0.0636023500409556	0.0792509438176739	0.5226142902259937
0.5770842020674093	0.9089475305459485	0.4305288727031349
0.9119035780013874	0.1499895145228892	0.4005973399682499
0.0727719569647335	0.9299442624824746	0.3636748590854297
0.7424853590077058	0.8264872778888338	0.4353094310508689
0.6534863894294913	0.3548591409250825	0.3934069763127294
0.0548403058443123	0.5629769920650142	0.6558249742235319
0.7323158068579440	0.9386568525862844	0.6600524664582197
0.5214175130230737	0.5688264638964112	0.3913096446500992
0.6049192837802433	0.1168797353338067	0.5192578173297432
0.0753539960658766	0.7389286075052462	0.2696534504403725
0.6039022335370610	0.6861610417964129	0.3364491303246634
0.0037811722557644	0.1379502293360068	0.2604307625799228
0.8965786674010563	0.9042813785013883	0.4298284016439485
0.8531412187268014	0.0262624190166538	0.2759916227503927
0.8279474850981442	0.2942127346657218	0.3977651551124903
0.9352276697021564	0.1424964390624063	0.5757260834153825
0.9030904219210963	0.9279968590230450	0.6629065933918313
0.3874084434911708	0.8771003079089168	0.5652458566990408
0.2499013210632185	0.7150307902823252	0.3261275498941972
0.7101190394748350	0.6212290286396996	0.2737808876624396
0.1449385515341853	0.1948954234703810	0.6004568694989397
0.1665487277569870	0.9534476018554380	0.5568146466700357
0.7288983586399052	0.4441499460903288	0.2802965123889524
0.8825235208714532	0.4921018955647518	0.2601322748596044
0.8098282071076274	0.0936896789603900	0.6394338914002884
0.6533275354847117	0.1518961852080587	0.6528817558141145
0.5417107630809617	0.9792829946782445	0.5718360814166537
0.4580360329793028	0.1371016990382128	0.5635017633370762
0.0741504795589946	0.9298028989972098	0.6464763991420953
0.5877831377075953	0.7402480405852961	0.4172315190066963
0.8925211528969956	0.4004811363704506	0.3350245286604400
0.0619260030125247	0.8162736619228073	0.5777002985380968
0.9263180306574407	0.2322263752008168	0.3268579397484189
0.1446231253381606	0.4920520331167907	0.5266598000343981
0.5373045846813972	0.8154584995257053	0.5012163594015067
0.3199069944561809	0.0359271132789753	0.5549575899274021
0.4261151463639788	0.6524092182270994	0.3387858094408174
0.2492101256575580	0.8956259569365577	0.3775616809326749
0.5324159056846012	0.5581740729686158	0.5991816957178571
0.0740584659757083	0.3774948188154427	0.2853460986316957
0.7376990069232052	0.3104593112359493	0.6403067049979861
0.7127181177752241	0.3985515023467333	0.4723339572653604
0.8893096060048556	0.6214230987341818	0.6495081437916082
0.3774537561762749	0.8327251305080325	0.3032529251561859
0.2333851073879801	0.8558102685016451	0.6325025673205223
0.2216885265390053	0.8826533812644313	0.4876604461492731
0.4218733445441389	0.2853568646261838	0.3534535947620380
0.2061927894092770	0.4275837004226121	0.3617243016958145
0.5021654780233542	0.1266158811551830	0.3476341624767701
0.9520562559475195	0.6692426351388766	0.4962534101031183
0.9507561401491686	0.9604237843840924	0.5822803404741422
0.3849038922870268	0.2877099018946194	0.6015754471466188
0.1118641093370335	0.3626462081406526	0.4633806570360400
0.7036649612261440	0.0191098042004701	0.5793751161077126
0.4973403131318347	0.6849263949554837	0.2635832887604989
0.2014458904863130	0.5224789593347243	0.2826788442394146
0.8207562576676702	0.1919792295541631	0.2554697921249690
0.3238546158438949	0.0057275683787043	0.3143431359385918
0.8761704223784891	0.8203818208028311	0.5114709425601419
0.2368624339422218	0.4772060050908300	0.4420734513947880
0.0627381540868346	0.6373235308697631	0.5744010393145221
0.4446819505680441	0.2904710541487787	0.5176189311548410
0.7416036448861184	0.6616799853973556	0.3993225616970741
0.7710839261426196	0.7491640726938728	0.3280099996606307
0.7853764300493782	0.3489009154977537	0.5578584626088805
0.3844554346520866	0.6015895207818042	0.5491731013459507
0.6530865789450384	0.2039291111361698	0.2625611156537229
0.2846916296804466	0.3687430673549689	0.5050822836769839
0.7383366865480065	0.2988086824480692	0.3222880477298311
0.3505749815813274	0.6700900172448232	0.6325403040369508
0.1707892771754255	0.6986200230423772	0.6445651674394748
0.4876700429503932	0.1549763180589640	0.2663483838118967
0.4285215886303297	0.4384533972464772	0.5593798201095594

0.4200961221797143	0.3172515836530385	0.2693377220865438
0.3847785985834311	0.7831966751272740	0.3878561331842538
0.2656716839773159	0.4309068012827590	0.5832866415589186
0.5583086795923147	0.5252996484358693	0.2723557230689502
0.3471096118239101	0.1283055735727864	0.6366091460758225
0.4603905350600273	0.9885424388064662	0.5019977319890920
0.8431850102890002	0.4574895115534343	0.6231516738583981
0.5305416626135870	0.4195094388571767	0.3391755036145174
0.8382460676653218	0.5699421537976290	0.3397023719871292
0.0139819303914441	0.4656600238863158	0.5826660111220424
0.7307884353543989	0.5151199631534992	0.5460573635625167
0.7816595706447588	0.1281209373620454	0.3364912463595421
0.0371340332981391	0.5538958327572199	0.2774516166739222
0.2673849823790674	0.2518475552940603	0.6725346536478258
0.7532082381736374	0.9034495475777626	0.3632428119990985
0.3683842033409819	0.1439260769886913	0.3982140843969158
0.6881484833479706	0.0048768846632560	0.4758830255339154
0.0924750148239808	0.5842980427579676	0.4604741926600937
0.3755360431087814	0.3130281283554411	0.4351907644411147
0.0060961282957195	0.2264444875766667	0.4924095779904581
0.0402803056314740	0.2469205454277500	0.6817628137825202
0.0468863969130220	0.8111351172806609	0.4382382697560465
0.3364418335825211	0.6257024817236611	0.4160066549731369
0.8376073801526934	0.1619598204155236	0.5076250024552292
0.6222581721250763	0.8258655873765192	0.5861733935028454
0.5925008695421951	0.6931230238230899	0.6449421462781512
0.5692162367430975	0.4663466119465853	0.5133364987471656
0.0807687616855399	0.1501464276133413	0.4258631147551512
0.4814156403909201	0.7298146411076376	0.5708379399822097
0.7378430258811878	0.8921713474214454	0.2791353496074572
0.7304239053864854	0.1899270562010437	0.5716541071879987
0.3791551627856748	0.9513695483045123	0.6406895762225862
0.8976344236660813	0.8374694369549166	0.2721529062878193
0.9029568804058365	0.7374600514852444	0.5855998328558911
0.9770610408730408	0.4658187931112668	0.4994811568455373
0.3887669746524397	0.8792953862799098	0.4523054662615046
0.4772056262380933	0.6565321887111163	0.4643895756802963
0.7328310413378494	0.6826969874609057	0.5782185672490110
0.8917124094051646	0.2600882718158442	0.6353476908920427
0.3963353327169318	0.5013367058616015	0.4781796541778958
0.3902013009288031	0.1412643248975552	0.4814653622905185
0.3630998462559493	0.7566895244670050	0.5047145759842847
0.7998785176373842	0.8714881367948980	0.5888147027302519
0.6190335905737084	0.0010825018529764	0.3592572251853432
0.2543116754551570	0.3556759968142394	0.2843592317700938
0.4911918230628254	0.3985871101014375	0.6287817866773340
0.0673520652117216	0.0635037407333408	0.5988848366561105
0.2907418284638249	0.5626205975415850	0.3470053686256284
0.5764983260866767	0.2671827667851269	0.3313391664966950
0.1496601142705220	0.2657248443045608	0.6511713420395512
0.0765074131815130	0.5897519955669750	0.7539211274450860
0.0868799367313858	0.6443530409600287	0.7379405780779973
0.5012154328074306	0.5362751368159837	0.7032301813416929
0.0170136432313016	0.5690180373268536	0.7466335355365952
0.1183771318847249	0.5456457755446551	0.7431688945387611
0.5717012080793512	0.2443055846671480	0.7057356816996379
0.8211310104826341	0.6927204189143504	0.6776972470633292

Atomic coordinates for Fig. S31 H2 on clean surface reactants (0 eV)

Ga	Cu	H	
1.000000000000000			
15.8199996948240003	0.000000000000000	0.000000000000000	
0.000000000000000	15.8199996948240003	0.000000000000000	
0.000000000000000	0.000000000000000	32.7360000610349999	
Ga	Cu	H	
196	4	2	
Direct			
0.8734577242354619	0.7715706072181983	0.5000989570506505	
0.5586612451286321	0.7739924950349641	0.3361460974761036	
0.1102317625832147	0.1862865905689674	0.2610619514841701	
0.9661839821128869	0.5606575737818786	0.5758995705973385	
0.8609551881066491	0.8404789767867348	0.6392982971090299	
0.5925744040729148	0.0346867240627534	0.4393263380698028	

0.7323270518485232	0.0483482088888426	0.6634357733647979
0.5844378386022799	0.2391620371428482	0.5619065194507881
0.4937653067195756	0.9237476160503031	0.3612401137856514
0.3529247948790478	0.2664130452245404	0.6611149559768555
-0.0155796293741876	0.7165736570444508	0.6418193249276966
0.1685857147040692	0.6594679747779995	0.6615904650126828
0.4404255622210780	0.4711808944355386	0.4558794424419800
0.0845269131593470	0.0688464742651546	0.5862967442776852
0.2327069948876468	0.7971923176292642	0.4649496927101893
0.5018363756152998	0.7158834478519877	0.2583469373866464
0.1740213276766429	0.9930869690074998	0.6541064642104388
0.3272614902912095	0.3371162057373944	0.4493620607077876
0.3130389555307037	0.5090693643734752	0.3482965240141756
0.5964645686078313	0.9681631610697283	0.2845941636720388
0.0733780363961389	0.6736198573656221	0.3409048695346226
0.7145352459981061	0.2752640652646901	0.3023664790164354
0.8224318393406256	0.7910842780655108	0.4181696755132441
0.7518801291000846	0.6527922127237096	0.2631143983930945
0.3195896820524235	0.5139613972298825	0.5544288519423106
0.4912386218236687	0.5235486720241563	0.5690453076995833
0.6552360719727477	0.8024458447151148	0.2660941515423327
0.0700669913347676	0.1578768380270270	0.3481475454609725
0.7569802423008168	0.9588901846365403	0.4404029418803905
0.7611369023462807	0.5786404547642393	0.6462013733420496
0.2396265396698016	0.7064936395086264	0.3732176729437670
0.2668845754341844	0.7938671782408647	0.5863139385854778
0.1153069336130492	0.3616258678023544	0.2564677650033603
0.6757873985024054	0.1084238954957954	0.5889053358939832
0.6061119472706052	0.5082768523028084	0.4269427748914741
0.2461119769313449	0.6658883942322372	0.5171530436968094
0.3283788726761490	0.7472740965633178	0.2703951604198395
0.4213136641961193	0.6173716675373310	0.4998234834983898
0.2722207975337147	0.0634134595512546	0.4477478154710651
0.0896784632147200	0.5261217067862479	0.2832190925745436
0.3155386039324358	0.5079342426781055	0.6396111570675378
0.9619987144172597	0.8835172512602463	0.4475994970888064
0.2611131036968544	0.0307335181825444	0.5812902665816755
0.2671855038625249	0.1267077963425157	0.2772832017808357
0.8004319040957050	-0.0217156150485981	0.5890914263146398
0.7446413344530882	0.3835501147685927	0.6271972567276011
0.5170362994356777	0.9186784355615105	0.5311584956436169
0.0699869275520274	0.3890665032868985	0.3402008431633430
0.3036599171753606	0.8677173445870945	0.6619310366974674
0.5922751233007940	0.5648447342560448	0.5033784089688784
0.9586690313922921	0.6344247343766450	0.2719705902064783
0.8720682851594067	0.2412697841041150	0.2767024024579769
0.7263969580736570	0.1763218376250833	0.3740363989057301
0.4111469203441829	0.6792751974866822	0.5812955468526065
0.7526413486049621	0.8165485372190434	0.5625881725016786
0.6670662017412164	-0.0019882207272919	0.5190956635778637
0.3755555470830645	0.3574035094626166	0.5885668811320561
0.4727055797447463	0.5852356347459559	0.6519672777313756
0.2224321705484607	0.3760170875040670	0.3886801369237471
0.2189281265400601	0.2155679793162687	0.4794033677274592
0.7303414146498077	0.3403498188402747	0.4116709760620246
0.3528717896214602	0.8236102087031786	0.3463482766845416
0.1615469428072272	0.6248920475926240	0.4416554898048198
-0.0803909309106611	0.3121646057807125	0.3492245922056498
0.0199066940715703	0.5091828965182813	0.4260202355380576
0.9483359901070700	0.6589182217742334	0.4019124014943933
0.5509099319214820	0.1358452143490912	0.3709170466950424
0.4200759247125385	0.2126781981333803	0.2788802463308094
0.8423140135386403	0.6770343997012683	0.5831048261253386
0.5484301261514947	0.7330539494842007	0.6418033951154876
0.7720248355548083	0.9366461354594453	0.2849652568978695
0.1238841260362985	0.0052913273521330	0.3102508972494675
0.4722840412754615	0.3643995766331186	0.5180694535020561
0.9532877075446230	0.3869846155754830	0.2684556767560507
-0.0481410829380837	0.9421141294869206	0.2981702256818923
0.7993658604106696	0.1144691326543068	0.5258600747191623
0.4846325910132876	0.1592341118110621	0.6512799971245521
0.3877790001685731	0.9144995628471916	0.5852038352270774
0.4401721499922488	0.3703447257276724	0.38216763999946255
0.0002577705620285	-0.0108706090874477	0.3810306443242622
0.1809700042239080	0.8852520466915879	0.3709253093744236
0.6975637353490748	0.6773872812098766	0.4313965814591340
0.1914387715932636	0.2731158464593981	0.3227587762946998

0.5952959698431352	0.2867798815222479	0.6456910712666133
-0.0304790758818692	0.1182997715057409	0.5209595201726347
0.4853378433806261	0.9001468354550048	0.4516282387072985
0.3874883870389494	0.7941993853006205	0.5177102549524230
0.5924355373564391	0.2972567061526332	0.3677739393242780
0.5370192460436011	0.6653230253621949	0.3995264707505833
0.8577768861951077	0.7881076677489605	0.2746621080153644
0.7702336131371146	0.1025408607101697	0.2983567068290916
0.8406667593693639	0.5086865796683333	0.2719315550186505
0.6622575530307414	0.0038018816616229	0.3600061311156064
0.0336875027590550	0.1296714747402646	0.6631684278214317
0.8548282520989690	0.9443130994483477	0.5126479127729068
0.2975908520602475	0.9435656932521915	0.5100690447512262
0.0846203245995748	0.7742349834292483	0.4128939446550121
0.4226987391773506	0.6555732307757535	0.3354884570184525
0.1521216860523538	0.5126404976297703	0.5949423442927568
0.4603959563354560	0.4056984244838824	0.6616613610853384
0.3416335368226752	0.3529669371065504	0.3147226735694472
0.5939425567819065	0.5798875584453217	0.2745310416524149
0.9145576802566340	0.2687218177412555	0.6570576235175702
0.7754413252056596	0.2627232920448425	0.5696735017270360
0.8968378189486411	0.0168867428159615	0.6609050138844604
0.5764542214243653	0.3453990347211910	0.4522699507651960
0.1320676803390109	0.8227233507863130	0.6374170076705510
0.7984235614402432	0.5048660998228578	0.5646536757406106
0.9008220026958335	0.1364645312479242	0.3563549263120898
0.0570134606201748	0.1254125581200615	0.4431093994743774
0.8307622569120399	-0.0313829315976378	0.3655466496289537
0.1029557808871457	0.6837221940348587	0.5742540727538372
0.7185400087764184	0.7462559997534892	0.6414727670294048
0.4237341466114032	0.0520572907866278	0.4075225025363471
0.3969681314802181	0.7487739104196792	0.4316211898067019
0.2994565785967723	0.9611555782969182	0.2800890425413449
0.3715672986117300	0.1664227736372267	0.5867752861251759
0.0313014715286864	0.7916670078176621	0.2846118759034601
0.0100526797212808	0.9310245185044913	0.6165712195826520
0.7095918585008172	0.2855938160465232	0.4951046108398943
0.8862946092835438	0.2875973893600005	0.5012240089640081
0.6747058102800729	0.6410228675432964	0.3438172531964991
0.2064520087358783	0.2037471520094823	0.5633286301660659
0.0215593466244403	0.9541122220651629	0.5275625167540420
0.2110563535290262	0.1941625962836460	0.3977067800412940
0.1480489444404707	0.5293266067639345	0.3706947893738325
0.3629938137136420	0.2045800352464790	0.3599209501715229
0.7472080607578854	0.6472607445313381	0.5095414477144291
0.8740839962461007	0.2291632091339463	0.4242682643437380
0.2503561377054200	0.3602317505233437	0.5308035890789307
0.0489196714144088	0.2889709926817751	0.4100145682520998
0.6245460455826319	0.8538538261060902	0.4081497906124749
0.9487879129295307	0.8192935166380934	0.3607863003530685
0.9468259899419569	0.5162256828419484	0.3453564855473867
0.5918529585906129	0.1426478530097791	0.2893787501309489
0.4394409943035508	0.0571807079580879	0.3125151940041545
0.9018254156943497	0.6104852716339944	0.4754474149681763
0.0452500778431573	0.7276954736655183	0.4922772545076869
0.4774856953000151	0.8812791433499326	0.6524487761015251
0.4581046801317710	0.2237002127817156	0.4295639461879093
0.8431811565180037	0.6665211756166795	0.3386371364968015
0.5661756926623174	0.1747917632119020	0.4889754685827383
0.6302369806552310	0.9083230892065706	0.6009557189268274
0.6516468303849583	0.6252118181856516	0.5794900536641495
0.4692162269136809	0.4737258971418703	0.3053256962294188
0.5093766687166303	0.0651392738534020	0.5759085030958131
0.6822484525402244	0.4351999447290646	0.2708118064493148
0.0812524215734737	0.3962340082844049	0.5497882338617016
0.3382481593821703	0.6969489182557778	0.6602666506276954
0.2261158982843593	0.6237690574331634	0.2993573551429339
0.2630289215497910	0.4986562938965156	0.4783657069031594
0.2608228037620490	0.4655958000276803	0.2625624639240891
0.1266339086724849	0.9400428071037920	0.4538803305040506
0.0780742753190695	0.5569686042592968	0.5096896178711677
0.3881697728139558	0.5807166781627979	0.2554253485967690
0.8924710329662364	0.1354577282276749	0.5978751857925647
0.4300226475988780	0.0565581569061360	0.4945948846450797
0.9179427158217943	0.3656134247476530	0.5787358320402078
0.3360071988716527	0.5944140299168107	0.4198814609277782
0.7895048087411956	0.5486140996336872	0.4011128954740559

0.0293425359572948	0.5534892971762665	0.6538777340206408
0.8895120730705313	0.4631329483245985	0.6480395803454208
0.6171079900557916	0.4759993593396927	0.3491395218907730
0.8895234281969860	0.4045658241108881	0.4224473130942581
0.1735402875324865	0.4727396227460868	0.6836233864906607
0.7533475975648476	0.4682803224640659	0.4781264985570489
0.3267776722512266	0.9035511797980793	0.4179302829641484
0.7359190753817443	0.8136400115697373	0.3460542267761941
0.0499940280536609	0.3704830780369964	0.6493586640292526
0.5499048156852029	0.7327727927815019	0.4763231033090719
0.0418686270109288	0.2388078851020743	0.5882672438434117
0.6114447387998344	0.4908758514028926	0.6335819035512473
0.9719656001544942	0.8004703775588804	0.5653839837890495
0.1493177830640661	0.8481242692826481	0.5356581805296334
0.4504274491177979	0.8799395309150906	0.2762750177137019
0.3534562706863126	0.0413644268907011	0.6560531990308516
0.7530086369417444	0.2143143352822668	0.6513952887940725
0.9269429845735483	0.4552993369012436	0.5057856424993021
0.2108176254265171	0.3426070423919503	0.6206976255324191
0.0583745416896930	0.2587839028348906	0.5000810486878913
0.1887256863836503	0.8361617642139371	0.2917295540145147
0.7290666950131952	0.1367174470845809	0.4531384144235325
0.5627467371175130	0.7649167211858556	0.5586424650219559
0.7880206002695126	0.4234759674075713	0.3417737687596856
0.2069829639394791	0.1691754823152462	0.6499992772927995
0.8966844295662216	0.0609016884625073	0.4450672013916606
0.2843108393624103	0.0419743969237859	0.3566559002860417
0.6554986629025386	0.4156662886912877	0.5449474481752929
0.5698935941034183	0.0179547136417454	0.6583350310144690
0.1261322401009154	0.4005291899830002	0.4642345278146973
0.3847211200096865	0.2199915127199812	0.5106648379010964
0.2754591552417855	0.2929613422483285	0.2404273736937520
0.1620442541970303	0.0624172431882049	0.5128147240173290
0.6918331556428451	0.8281521764561014	0.4870212089895554
0.5469360791554680	0.3247141662178409	0.2880521827823817
0.9675102635421053	0.1028144962943360	0.2785373475469544
0.5337727202387831	0.3775256233102346	0.5889605605842957
0.2528025682511757	0.6354452901230643	0.5933201592526984
0.1456142581088575	0.0412853507568735	0.3927165595954397
0.4647049544308615	0.5280126988040176	0.3820840189250213
0.8070157814495318	0.2897677517863654	0.7651088256586960
0.8114382783866336	0.2841121382013650	0.7422843628827133

Atomic coordinates for Fig. S31 H2 on clean surface products (-0.54 eV)

Ga	Cu	H
1.0000000000000000		
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999
Ga	Cu	H
196	4	2
Direct		
0.7736234927616213	0.7968043440550541	0.4925582774410831
0.4946973675521972	0.7704627018037604	0.3603831619135633
0.1426250559353428	0.2853798527520180	0.2454254986008042
0.9655600461487763	0.5795931949669233	0.6410132303234424
0.7316390045725093	0.8560250278789616	0.6414388044742076
0.5332865923329113	0.0793553339637649	0.4387159802752020
0.7827388257313872	0.0383140690651029	0.6484242812326316
0.6852953462436315	0.3099680374440949	0.5510626783192878
0.4752810147067862	0.9083949627007220	0.4131520689256239
0.2405096197687190	0.1780463469238625	0.6291334443910891
0.0105766542039283	0.7524111611746130	0.6360001304925956
0.2337373779846363	0.4947880137436982	0.6511875652254270
0.5016706087376230	0.4168281711664260	0.4678265054566638
0.0016079965072113	0.9479190693016781	0.5955485862721234
0.2033210376820021	0.7631701062910254	0.4906399495675903
0.4853872220856992	0.8403663067562398	0.2763088532965559
0.1442670740363767	0.8795521526842518	0.6318480817049090
0.2750561759909438	0.3795197123753908	0.4234693372638972
0.2042795224054208	0.4409047203669906	0.3544331763625972
0.5289321940725813	0.0050707648122691	0.2639374516433524
0.1369287599951430	0.7465048312258301	0.3536774180438467

0.6487667061937378	0.2983500015775020	0.2828769103138710
0.8753506003214535	0.7315179984423470	0.4225647629931498
0.7687324375530342	0.7371782640688737	0.2756245137840075
0.3766787319315942	0.4947820582307574	0.5479992251268494
0.5509257105625205	0.5484899260161569	0.5797219917581629
0.6652922987522684	0.8913182548985903	0.2754791405314501
0.0539442396617980	0.1674585407014899	0.2924124861222492
0.7759799901944880	0.9628584741118839	0.4809799070030980
0.8069821925323283	0.5243411000855865	0.6457035998590823
0.4012114823698621	0.6365470038938708	0.3951485369821927
0.2048923366957378	0.7241163568702079	0.5996110170551929
0.1423463971624878	0.5222958835454151	0.2761704134820843
0.6375684674143368	0.1346381425385585	0.6332519532591033
0.6169864297364297	0.5610017033296214	0.4388469300323228
0.2205217689895981	0.5635042620686513	0.5094230785935063
0.3193592712663765	0.7991104026162779	0.2633152671909204
0.3542371498323165	0.6764264290305826	0.4729871929768479
0.3713810473973206	0.1016890102274809	0.4673981982802575
0.2000385220685851	0.6847666202575634	0.2790606175126624
0.3171680216677173	0.3485083544151457	0.5883721778954578
0.9687483976167393	0.8834440623736989	0.4447179840130693
0.1652310900234377	0.0239865381281791	0.5831566668004801
0.2199244424674215	0.1244230463698807	0.2593132288272736
0.7755111530570976	-0.0324249824021404	0.5694246394126610
0.6979430199483749	0.3915372779671880	0.6275542047867224
0.5211266377211023	0.0478245186536084	0.5808674617471223
0.0469756029902904	0.4002688324818096	0.3315247510218364
0.3330122871701290	0.8487853519252323	0.6422583868016011
0.4975307866673943	0.5807520979092379	0.5014085835489622
0.0188814409463230	0.6625316014553952	0.2911565307615225
0.9667956589386899	0.3112037100187069	0.2612891092587237
0.7360112802687733	0.0456485651986621	0.3594087511944392
0.3483618645156468	0.6910115511326248	0.5534840964620541
0.7209836491936146	0.7578579611810338	0.5679899356155453
0.7297355133385955	0.1419959450397116	0.5620161126460135
0.4135435223486481	0.1807565264412408	0.6226773931024262
0.4043873508550108	0.5185836101885645	0.6317731083340727
0.1264240699212395	0.2981082329158221	0.4150373351253793
0.2074199219961808	0.1425494197940839	0.4371988674074234
0.6716439022352323	0.3695041778088790	0.4507995392810760
0.3167237863958107	0.7549402371884182	0.3466465780210901
0.2242810651754877	0.6574795479107929	0.4126073711335936
0.9438021253649387	0.2664353604712538	0.3481604166513969
0.9860486032658473	0.3940646715848961	0.4121628015973474
0.9778977536800422	0.5877567294001621	0.4223557967977013
0.6073162557044453	0.1649741286272708	0.3730381181864053
0.3374664430731122	0.2495333880203108	0.2692449374206725
0.8811364406857463	0.6465939070637464	0.5759814544144033
0.6315529074580309	0.7151432759500983	0.6379843526175046
0.7797342063352948	0.0255646675698240	0.2757657816717697
0.1239469629958453	0.0181062397651496	0.3097142342745338
0.3311397097759444	0.3503021979567272	0.5043035031673604
-0.0259587845282627	0.4884893018219998	0.2670289889602919
-0.0383596829356294	-0.0269050352206822	0.2825531924956590
0.8691868368423326	0.1072839301209914	0.5062657652917559
0.4333981345104919	0.0203435799133943	0.6537458263495723
0.4373242082975240	0.8461201024903960	0.5690908520318189
0.4991449479254423	0.2928483607076265	0.3946138295097444
0.0123869599125958	-0.0302959316184619	0.3711832218504202
0.2155817725757172	0.8987735824341724	0.3511527631737463
0.6900091672815658	0.7386471716053745	0.4259931725873552
0.1814124101213893	0.2742127898663471	0.3302842697428894
0.5641607271433393	0.2796415877548014	0.6277436325221070
0.0315735424617885	0.0897669114386916	0.5348759215502796
0.6048224312249011	0.8605553629854349	0.4861545868725873
0.4284244636603371	0.8281119024302017	0.4876447997831211
0.6764114846843321	0.3215646134934246	0.3673606755678688
0.5460049942896809	0.5829663509394648	0.3573373905526003
0.8237823429632207	0.8829325326468855	0.3239839897312775
0.7896020784938855	0.2142072882828747	0.3072515744789016
0.8225668775954125	0.5701653569458500	0.2752234507379990
0.5663371614303184	-0.0204092357289997	0.3444239884289181
0.1157887140744060	0.0778844353745302	0.6765214581601543
0.9273688268385580	0.9341141843135921	0.5206947971270941
0.2890502385780925	0.9449533744627896	0.4877448448928849
0.0627657454714626	0.7423803145802589	0.4279870161943625
0.4199782291791589	0.6635674528697783	0.2902073187924036

0.0936143074974231	0.6049494311753933	0.5755366936301628
0.4183783500535219	0.3484365176016341	0.6513216037962150
0.3546277304307504	0.3370434288270156	0.3425099069366024
0.5990200409518618	0.7157705340295000	0.2880661273329712
0.9318322222181320	0.2127917034192491	0.6606432702630148
0.8605651303798184	0.2728548925226947	0.5640456137201165
0.9548672338118173	0.0361386572113381	0.6647426135261122
0.6511837210291355	0.4714541294401958	0.5178823561368688
0.2025337297072793	0.7654439763714204	0.6887127933184622
0.8076047958031290	0.4452326247573103	0.5608438968990043
0.9014854419752246	0.0882008367805227	0.3427960808744509
0.0573212621485874	0.0481282386069120	0.4516270193125982
0.8105908657316779	0.8872194193583709	0.4047095979588149
0.0678394902833526	0.7884712947600155	0.5550634816473512
0.7172926284240901	0.5881882551311539	0.5803421920555037
0.4386817023835963	0.1030423365336867	0.3673222056506466
0.3138233286621785	0.8212667662367107	0.4232866045788400
0.2679104225698399	0.9577469134606389	0.2708384335544859
0.3477407529928281	0.0166546677673414	0.5729204187474224
-0.0712262276073500	0.8016575578804015	0.2657139887396225
0.8974413137671073	0.8742629619065451	0.6604516868884198
0.7969307994500945	0.2506163367295505	0.4799412233108866
0.9607516173544984	0.3162188360546341	0.4976400342752368
0.7036188380611486	0.6619777698350656	0.3517361312478203
0.1909090709863182	0.2500368746214677	0.5579856552584043
0.1133071358284623	0.9316277777887397	0.5142628071505742
0.0735467746518642	0.1568405519745621	0.3739885224512683
0.0879730756396407	0.5753810656499668	0.3578539333450400
0.3376668933753897	0.2283827798333473	0.4078377294886092
0.7122150815592719	0.6328117739275674	0.4992257080010823
0.8045408701729060	0.2160037856047060	0.3942441876382546
0.1604911892673226	0.3796084712714126	0.4952688055874541
-0.0395869341723000	0.2049649557655901	0.4346976873525450
0.6474261898912514	0.9471868277289898	0.4178226632923404
0.9785322054224814	0.8122447719392291	0.3532503753280721
0.9164939525325683	0.5188192658706509	0.3500508623178418
0.6355506821689890	0.1227346539057488	0.2915647294297100
0.3868480271583549	0.0835998372100921	0.2863504857941750
0.8799948222709013	0.5864271243933189	0.4973579235429558
0.9353761906642367	0.7511333886259038	0.5045467317748668
0.5039532071188874	0.8395305350286305	0.6475301996158117
0.4542387164430531	0.2504687166356031	0.4739173600950088
0.8716150378907737	0.6831674236710602	0.3420451796320625
0.6187702204738028	0.2198482463202711	0.4820661514603695
0.6090653689516096	0.8951583991839207	0.5716061908226874
0.5599760143965602	0.7211967692726082	0.5388684133464686
0.5378418094029929	0.4066074222435654	0.3220415536106764
0.5326664282187713	0.2060009190980538	0.5527159337081676
0.6901782548929178	0.4590217842594788	0.2680466079507414
0.0182863038056301	0.4765935252161058	0.4840778762567546
0.3244236055419364	0.6604782222157858	0.6550990834938578
0.2848096125916417	0.5818015259942888	0.3353595446628818
0.3506842444768264	0.5072788183393597	0.4622454431443556
0.3991778728180631	0.4870885324248097	0.2914155542852196
0.1513096306970886	0.8942637306896103	0.4332811954719020
0.0723158240834142	0.6470928944824047	0.4965311429654795
0.5544481363075706	0.5542117723230856	0.2718927736344263
0.8998482150820472	0.1095276748793138	0.5903432567372792
0.4701564450761976	-0.0129408986387381	0.5067428148163136
0.0309586979333502	0.3217164695587283	0.5752432346958515
0.4151557317993074	0.4688526733997708	0.3859307437357106
0.7919983947660059	0.5722639887377224	0.4192486593415361
0.1271763729266032	0.6212445300375848	0.6622828838018985
0.8974313424856738	0.3803476147663860	0.6316562393639497
0.7034115287248246	0.4930626082618161	0.3509177175403123
0.8230188618356957	0.3990450609877312	0.3949326151775827
0.2390009473372184	0.3347920775132817	0.6660639884058567
0.8262588924627978	0.4269957416736719	0.4775456949364768
0.3163212675682877	-0.0008294572574664	0.4055256606304578
0.6621689797882158	0.8302313479409423	0.3551079268373585
0.0626622606086948	0.4327292352306872	0.6446492661076992
0.5252203771300989	0.7144186092758726	0.4432113237573634
0.6882907832411104	0.1688997026577969	0.6070831903072677
0.6399537036201940	0.5520535891857036	0.6570350568628653
0.8789560215534369	0.8183217957366326	0.5804979389063258
0.2622673693931708	0.8584118263660243	0.5584548828866220
0.3910004439556257	0.9288455064941643	0.3344384671546650

0.2622121264928829	0.0090958676583453	0.6533191333375014
0.7714036226640008	0.2383582230783200	0.6385139533544464
0.9742937582446706	0.4890507170484541	0.5634650735775896
0.1680084594560868	0.4368508089496567	0.5736459691117185
0.1000025343491979	0.2151497018996600	0.4911717592018633
0.1048440810113425	0.8431312422866449	0.2825443024126337
0.7139057920759005	0.1065910089377280	0.4417322568610745
0.4698420123665359	0.6848731593008331	0.6119647241710195
0.8295039612697298	0.3888358263179754	0.3056586767439127
0.0878263063645436	0.2661642142549481	0.6781954154402999
0.8875816100165320	0.0464399603202618	0.4236051274956299
0.2636449218170301	0.1260921104160319	0.3466525837058388
0.5139216890881736	0.3813833562078844	0.5559437176449655
0.6048436652028527	0.9749382924308514	0.6500228016497915
0.1559667827957368	0.5089947980183400	0.4322940674682746
0.3611787586350120	0.1947559594411039	0.5430714543626837
0.2598058943990465	0.4014360666569273	0.2706756972392202
0.2292413765551535	0.0982773866780332	0.5169446421353929
0.6355825395872206	0.0382107253899294	0.5144900334452492
0.4907865164286505	0.2301060722172642	0.3088845623342919
0.9037031739651572	0.1394855602848331	0.2576497984668313
0.5429201172702427	0.4363346694720148	0.6346638296569486
0.2591912887050694	0.5716501698334613	0.5839660507169198
0.1600056104175644	0.0281366492241720	0.3892998724631711
0.5734912660821999	0.4363742745541472	0.3971614875257040
0.1138406658270142	0.1719120927507872	0.7080685061430986
0.3471479468499622	0.3297434935764806	0.6908517335518828

Atomic coordinates for Fig. S31 H2 with preadsorbed N2 reactants (0 eV)

Also atomic coordinates for Fig. S31 H2 addition to N reactants (0 eV)

Ga	Cu	N	H
1.0000000000000000			
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999	
Ga	Cu	N	H
196	4	2	2
Direct			
0.9498971864614653	0.9762448907601281	0.4885611689931237	
0.4578449825473340	0.6939198989217645	0.4124464514239924	
0.0045119468939060	0.5089415594162346	0.3509110324126123	
0.7709258010519086	0.7987896124970402	0.6214859743746498	
0.6217830801121265	0.8382707540525968	0.6611107144500353	
0.6703422947787443	0.1267942570462813	0.4912324856554403	
0.8263144213818373	0.2297067059049456	0.5842438687821180	
0.5194429684498334	0.5074292287387028	0.4916516518621796	
0.3752332430759842	0.9563881978169445	0.3877508473617343	
0.4551314936339373	0.8723410866636510	0.6262407846567607	
0.3385643811204027	0.5692799537414345	0.6548848742317246	
0.0660411799311283	0.5940231318619573	0.6406112227809906	
0.1514789821428726	0.2303755168090148	0.3687462574557613	
0.9799820152804367	0.1146259763611072	0.5813019177777441	
0.0426373903649446	0.8913489004197952	0.4147443781259807	
0.5494031332196063	0.9669569910797888	0.3644090236435380	
0.7603266046048974	0.9691241210908830	0.6359374514373485	
0.0194811013885052	0.2126329611588339	0.4239862964798485	
0.2882268584014154	0.1774847437653543	0.3197720454515367	
0.7923686070035446	0.1259677056093412	0.3840890684636623	
0.8442461236975167	0.5775740139208453	0.3063627779281005	
0.8074727937720270	0.2740822449831944	0.3352454219885956	
0.8841462394587812	0.5114585295890842	0.4626851612184185	
0.8989604888288452	0.7660316318249242	0.2735310273433491	
0.3293559030955450	0.4262275776944363	0.5913569288602979	
0.3750523349101875	0.7354252948074360	0.6639770164081148	
0.6836046639418784	0.9841338102171775	0.2877662994650852	
0.3892023139839160	0.1107063911092059	0.2577331859542945	
0.9684133976083045	0.7296821141393414	0.4362166883267212	
0.1100001787675547	0.1437901398877637	0.6956446873788433	
0.4464637001324407	0.6681226732771703	0.4962539563253383	
0.71717530331658742	0.6338927154410937	0.6134649235997198	
0.2701627531202996	0.3488780577232816	0.3155594748909564	
0.7343611374149248	0.2756185019123958	0.5133606695454556	

0.5605668655819145	0.6680690431704641	0.3427273246776408
0.2253034752185044	0.5820196337597112	0.5866217219017599
0.3112949692629564	0.7743962974324325	0.2898551009473900
0.8725727640679338	0.5718296284417321	0.5862812699296234
0.0820618251649837	0.8142059841716972	0.4916254137083236
0.1489722268103876	0.7042264502373984	0.2949498249499302
0.3480526280626912	0.1290567334135535	0.5489091863289045
0.9753724145883850	0.8114754404612536	0.3453002807234153
0.2705303319254075	0.9751913659536164	0.5807937752368389
0.4995673685163688	0.2367391872228019	0.3097037086546274
0.6083063167258338	0.8119024300276670	0.5777617775260108
0.5393512278992918	0.2896928691727967	0.6547423269718450
0.7321774614351880	0.5133104157188982	0.4199068569222535
0.8878499727260311	0.6071942205857866	0.3888816698520437
0.1243176342213949	0.9161828084040468	0.6411864913169741
0.7406284906835872	0.5844156818249978	0.5184394762681059
0.1745242857727713	0.8853694818697090	0.2766672033102840
0.9418126983071919	0.2696913002907883	0.2759754494210737
0.7486095650177043	0.3058315963671797	0.4183681060039979
0.9257425576700734	0.7573972121549827	0.5845636144750770
0.7554820226146567	0.7506186461545123	0.5390966544544412
0.9081591839593641	0.8222220420945392	0.5082613686310276
0.4476987812462004	0.2726443146814154	0.5748669862536011
0.2038016962609589	0.7166453496285552	0.6430330537510720
0.1496555486961908	0.4041671413235666	0.3720058957828368
0.0997197214241341	0.2492375390960107	0.5509964445678642
0.6407705308222238	0.2974458039669865	0.3483754490545503
0.1686063954257601	0.5070716077894870	0.3000376460423230
0.2994350865703330	0.3097350928378923	0.4010871470829755
0.9917661126698281	0.3333141159411675	0.3564730165401695
0.9165713492176520	0.3522539766979753	0.4332885196036987
0.0438774123441809	0.4880743549100546	0.4298196782477620
0.6306350879163881	0.1717993981152990	0.4150439124637033
0.4407251067791922	0.0874344514572982	0.3406288238837879
0.8111214768132211	0.4314296985772741	0.5277100932897739
0.4576665569102506	0.4512456684608945	0.6539481571508602
0.0547334823505821	0.0064805994162276	0.3390040556530807
0.3713141024742654	0.2833202837595563	0.2558521338549768
0.3958305100387967	0.4489487845645647	0.4339836270252136
0.0018261965369214	0.6327040648413450	0.2836492926247626
0.9535332419340583	0.1620806940737420	0.3472470862290016
0.9712883755241597	0.3323443347616503	0.5925745851012246
0.5090308575448534	0.1346812352913309	0.6234725421279838
0.0872100734440698	0.9726788895375246	0.5579126678552110
0.6409227622971201	0.8344201616228537	0.3335668415264662
0.1331702839168680	0.0742399938538815	0.4086322813809214
0.1523588212150789	0.8289974388140375	0.3556203286077694
0.5845157904350878	0.6429313091179255	0.5527698697378279
0.4609823818690492	0.2244910918195483	0.3930528104395899
0.9731802381861621	0.3202373828546393	0.6774906249345247
0.0076673757335831	0.0363556216874212	0.6589253080790841
0.4936874115557774	0.8549383296701530	0.4249036508195764
0.4404722274503495	0.8101574363575171	0.5447924475962758
0.4301482878980197	0.6439440822050726	0.2851314856051370
0.4518664608307540	0.8112207330923327	0.3422207312806584
0.2307446201300006	0.0454117527913121	0.2622790956568221
0.8801707432624449	0.9753343772248488	0.3391502482429810
0.8443268916763801	0.9581173311324063	0.2557006730135024
0.8522644217209121	0.1919431573264634	0.4591419368832195
0.8551696093179840	0.1060504428452830	0.6447409231927652
0.9246935311085430	0.9418927573019030	0.5775058877297468
0.2896509003923901	0.8002462424492137	0.5838379527661471
0.3376159521666400	0.7806807614923399	0.4601560031082884
0.5573723144677278	0.7521964203746705	0.2639122990449995
0.2385619693968418	0.3422446267491588	0.5261752796319115
0.2633048758495906	0.2418444153257787	0.5924543136197119
0.6721083149339985	0.3835317312960830	0.2726823485175667
0.7050709510276671	0.6564109155597798	0.2822450631086496
0.8154407110191971	0.2707305950728353	0.6680105685149671
0.6546555926649343	0.2767380676767636	0.5891273376468368
0.7619865096028311	0.9330171323461220	0.5521043517988344
0.5628728704571423	0.3719684153444187	0.4102185458753342
0.9163335189969604	0.8849333856768905	0.6567249025346074
0.6219089183792177	0.6406233189338690	0.4633413712911718
0.8371072111314193	0.4333629215913336	0.3668688548497958
0.2492840091070239	0.8847840377917647	0.5117462675366196
0.9499731160875429	0.0447969018925298	0.4104936197569024

0.0620349932202627	0.6383552712433158	0.5621936203517182
0.3936527845216021	0.6560286485268714	0.5822779662173739
0.6012271490361941	0.9700833923960246	0.5280828700611315
0.3705735148305487	0.5670950491549885	0.3744262192801328
0.3621333256972230	0.9443597161041122	0.2981215396156208
0.5671758438728064	0.3687278568083611	0.5374400950913074
0.0051574975078732	0.9060220801957770	0.2752998135871493
0.6747949536203418	0.1642226879347806	0.6574719204689545
0.9197204442939407	0.2982649783231721	0.5174072537285337
0.8119236667169314	0.4052773519599124	0.6102682115840353
0.5858303916368824	0.7994356493049444	0.4951125741396315
0.3769423337263719	0.0361473596281680	0.6416043561843671
0.1056168178054531	0.8062027825868703	0.5739195372810336
0.3028547546449933	0.1240122646447626	0.3979292246252835
0.1926374757323132	0.5722726631102879	0.3815341453557576
0.4730021508078719	0.0817649860120801	0.4446779655805665
0.7933211863520246	0.6939208113852123	0.4481586690415044
0.1235604759593524	0.9853987854261484	0.4763034328105036
0.1859167306437337	0.2330953214618957	0.4585724706411829
0.0688540860902839	0.3536580497575385	0.4817245531654695
0.7911445931866127	0.0234168122384648	0.4547751039112395
0.3042032518629294	0.7375470031697215	0.3739380783267699
0.1103843030679633	0.3253614069844358	0.2877942837841136
0.8033547625139348	0.1159189074611106	0.2942195806484471
0.5547030483216578	0.0895598013647887	0.2599917263207760
0.6507478893103718	0.7794177584363242	0.4112357658074126
0.0740016402474501	0.6187016890031397	0.4777346576709525
0.0377305987236843	0.7625414009215957	0.6509712518676301
0.5361286625590710	0.2611214594943252	0.4732167299579965
0.0555314182233693	0.6710508199537299	0.3682478064967259
0.7192546056258434	0.6408860727608172	0.3672555309425636
0.6914687867573771	0.1028961627116007	0.5757962721679256
0.3443675825059237	0.5358446380252861	0.5240771021471125
0.4979443482069297	0.3982465372700464	0.2730397688994293
0.3620383520625830	0.2181136241939962	0.4728158167025383
0.8357385600215568	0.4127497638052937	0.2825658587810603
0.6012678955235442	0.5329877804768379	0.6535881205431596
0.1907612804673330	0.4952436411085454	0.6622097443015384
0.4249418433039108	0.3807456209993286	0.3543202157057861
0.2891376793422938	0.6007043869099965	0.4519246178103537
0.1169658188771970	0.1535539142318620	0.2947292711939545
0.1680828917221094	0.7258029192410499	0.4293096534855385
0.1633205068177998	0.5028331931408458	0.5178175555631650
0.5830157201091376	0.5474073875874423	0.2665509489802109
0.5231204608666409	0.1408336937469994	0.5346336111343903
0.2997763577425016	0.0467283853294564	0.4708710106127183
0.9555351721157338	0.4709218178593310	0.6445390744577260
0.3519281119419923	0.4877073877266834	0.2892288652582447
0.6531441906487575	0.4757302956582229	0.3440230326886863
0.8798484865543211	0.6647943199001929	0.6671308361788015
0.6692547218799908	0.4739700438369112	0.5800199400308683
0.6280736616396918	0.1132448162045952	0.3405405814854852
0.0047345624587441	0.4611345376515025	0.2719315887147707
0.1794897916835471	0.3349151904272575	0.6646687943867696
0.8054406417859763	0.7792836910847556	0.3461002478910219
0.2252475659050397	0.9939546291418739	0.3461149988255082
0.7265575841358609	0.9593206131050794	0.3784526260633527
0.1297616211709012	0.4203319135944436	0.5892352546758014
0.5452928940830946	0.5429307316591235	0.4065260769893694
0.1831169871804843	0.1126629707597748	0.5223330159249778
0.2685575199450215	0.1433215604252262	0.6706146977357521
0.9154997450372068	0.6470092277736323	0.5127798057051740
0.2217944860558669	0.7013632537461700	0.5203687207079236
0.8666057247376348	0.8659636880091296	0.4127721870056370
0.5358279610557878	0.6903624849951251	0.6364635075166832
0.6802193961975497	0.3795008774042225	0.6632054680143805
0.6677264052791876	0.4148071266820184	0.4752803532462414
0.2214385007425040	0.4335882847886438	0.4477484733969157
0.2884817351013859	0.8889744859921735	0.6586463830954424
0.5216791177287219	0.9172886029401816	0.2759970430038684
0.8420954877195658	0.0892647114045082	0.5321865696718637
0.4467474627617465	0.9916655358336648	0.5624739137552789
0.7367295585555660	0.8188601498320119	0.2642128844348030
0.1583840627202218	0.0920707856324189	0.6079228310344912
0.0089715059860059	0.1389329829642389	0.4984286923685161
0.6143540802854234	0.9785266586699162	0.4455132226840477
0.4937713391507861	0.5071880724894411	0.5786453194082329

0.5907503351875278	0.9848535738506735	0.6179150149269746
0.9875132176994360	0.4722227290741670	0.5392459762700825
0.4012401747321097	0.3702503426915643	0.5073197204620153
0.2324967846403206	0.8978549716315981	0.4221738403811632
0.4211497234800236	0.9333004835328650	0.4864747429895636
0.7455267902234159	0.8622630901109269	0.4727869402607685
0.6714002031359652	0.2142021167101968	0.2702690368784612
0.9692059791873997	0.0870651426304013	0.2669822187230191
0.3880126891936513	0.3145671103621581	0.6434366931033897
0.0605305852500386	0.2164303285084130	0.6234874897675441
0.2784796502237774	0.6220150076117515	0.3158835304475212
0.4962115144105861	0.5177529383131908	0.3321603027918524
0.0830700437223058	0.2631389902582515	0.6801529994336665
0.2784309594631089	0.2634904674146543	0.6528862618342767
0.0965953092435493	0.3062470071570497	0.8709889173192473
0.1100412246877101	0.3214639882627141	0.8501429955327469

Atomic coordinates for Fig. S31 H2 with preadsorbed N2 products (-0.51 eV)

Ga	Cu	N	H
1.0000000000000000			
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999	
Ga	Cu	N	H
196	4	2	2
Direct			
0.9787276338450502	0.9694493977876946	0.4865231383207150	
0.4404638800310340	0.6831889989467186	0.4124122239656307	
0.0098492459498947	0.5175316007000565	0.3570781998063509	
0.7695894539884264	0.8124967959748682	0.6195303642441475	
0.6317079358176295	0.8719721457347062	0.6709408509010025	
0.6724252159606912	0.1267870679259299	0.4958827742886882	
0.8887031898585090	0.2363351391087963	0.5839971129137967	
0.4944995878198244	0.5293051344314330	0.4870392321111035	
0.3771285965106866	0.9499357187623424	0.3793033018195503	
0.4688120403478189	0.8917974366895353	0.6469049773277082	
0.3235599195554257	0.5789414654607452	0.6600119307570217	
0.0541172009082844	0.5952941903515031	0.6410214229714750	
0.1355054189432559	0.1985919390639692	0.3583686404213172	
0.9760210651917240	0.0936608396458238	0.5672345400968373	
0.0635560868637363	0.8870584567357392	0.4206548707505080	
0.5545709844943637	0.9916933534133033	0.3679021433585267	
0.7829971525779152	0.9468499153242624	0.6707943317193212	
-0.0015018893913278	0.2254724355308304	0.4131340491092637	
0.2749724482490044	0.1475185207607770	0.3109069602765181	
0.8169109493103397	0.1555080432855372	0.3818144348274007	
0.8199223199985951	0.6103438164297157	0.3065358604930952	
0.8009301659441990	0.2945771440108093	0.3301006053153099	
0.9053271186744787	0.5317705362817340	0.4515395494609465	
0.9008500151939597	0.7765105121627449	0.2870654996769179	
0.3500971798443764	0.4250227716934484	0.5822759268594200	
0.4129349331884619	0.7253295227982396	0.6507902924128173	
0.6846252107591998	0.9920605566069531	0.2786449568562441	
0.3881868483734468	0.0678894195850486	0.2515961242040570	
0.9679023234847999	0.7315696858967164	0.4361845543073137	
0.0954144799229461	0.1433970705848155	0.6859054470654596	
0.4336517497586160	0.6859581750885175	0.5073613244715194	
0.7184580965182482	0.6491684899863117	0.6155010566895319	
0.2724932349047055	0.3180303358455844	0.3102463392475633	
0.7237456552675666	0.2912582744987514	0.5072756937847829	
0.5201183210746462	0.6404288331749339	0.3407646428864293	
0.2043963734572495	0.5866051656527749	0.5910560633689971	
0.3191755974224573	0.7439662623032999	0.2795045970325629	
0.8603830990015900	0.5699256335157243	0.5922695480605877	
0.0881415111987664	0.7996561381665777	0.4930502232999808	
0.1545855808460518	0.6810587167519259	0.2909603653398587	
0.3835889003845002	0.1526327290991648	0.5502952496156348	
0.9723345605562025	0.8491394252683279	0.3545679172677172	
0.2824374014948017	0.0145359428932430	0.5675740512878718	
0.5454555050125709	0.2113899255649066	0.3423904934821851	
0.5978117703522721	0.8298978725131111	0.5912831100525886	
0.5416917788828144	0.3142373778488889	0.6550540286723608	
0.7360513653288184	0.5594417183168010	0.4280017132700518	

0.8874687913671020	0.6247739934394644	0.3823879260537572
0.1192106089835401	0.9247397175887498	0.6360183356624566
0.6868752467812310	0.6103157938577192	0.5149319614406284
0.1833027915508636	0.8559866291889260	0.2696137229598987
0.9280676168139531	0.2839310121581333	0.2673035248517333
0.7483986453149601	0.3069760027186285	0.4122169212935216
0.9183895593384463	0.7458716006972641	0.5866928345857545
0.7440399744144928	0.7618409526842900	0.5422023531720502
0.9114890067876336	0.8178819363624922	0.5089038042895643
0.4759049157525955	0.2972941602330059	0.5727882123996928
0.2281822386319306	0.7184962859073603	0.6771621850485557
0.1459083126666885	0.3738660369034214	0.3704765837649019
0.1187849410713466	0.2068145516431250	0.5419162332820316
0.6381987797026223	0.3574152785233815	0.3466862914593339
0.1777976068241071	0.4738575822737339	0.2992327696909229
0.2969153654877745	0.2962860436807273	0.3947850763946633
0.9746335428401298	0.3498795781467066	0.3511357155187632
0.9080680346751228	0.3644831216417874	0.4332693056356581
0.0631683723262358	0.4659842040400780	0.4337965522898664
0.6442479464444233	0.1687068369526938	0.4169494503331267
0.4283572883610418	0.0872655597977547	0.3357904578041448
0.7940899665240209	0.4737324262659252	0.5126424215241541
0.4379648670192091	0.4582189027191238	0.6534809439001060
0.0553418209364414	0.0170105422724385	0.3396044577019757
0.4200532035257575	0.2339559813170707	0.2785029595917978
0.4080668385104876	0.4238336924040207	0.4278689056923885
-0.0061645214398236	0.6317375313182718	0.2856911042862957
0.9584569367530347	0.1724804471132056	0.3352252887885462
0.0317540764766470	0.3442485598081084	0.5731102779313701
0.4757227607924343	0.1556353233689517	0.6353566412536367
0.0989866922085613	0.9708931432058356	0.5485187957993103
0.5917033028396522	0.8255775853236916	0.3473892190090487
0.1257488414198686	0.0662642059767865	0.4167573783141894
0.1452109819077610	0.8231457999271724	0.3479434757776314
0.5598826325237544	0.6679035833151326	0.5692715994586973
0.4708463998556926	0.1410864417325464	0.4141596687021987
0.9665065279251729	0.3205680547970943	0.6642853130081221
-0.0119383900990503	0.0379760010505948	0.6492940584790879
0.4834779396993684	0.8511034555597129	0.4264920463063441
0.4145786834860863	0.8039843808931081	0.5744175955535518
0.4225879085001423	0.6112218896279541	0.2714245919569498
0.4192424401273874	0.7954339129998440	0.3496428652074641
0.2212921944711518	0.0212263567579921	0.2558470621675393
0.8743339281603248	0.9966218108806761	0.3354964993328773
0.8434974944714863	0.9438642985697877	0.2551056765796615
0.8513437350621532	0.2002217163496804	0.4636518249411674
0.8290450735280566	0.0998287350356496	0.6428288952980581
0.9263645568499352	0.9293258255768984	0.5765871541853232
0.2412289963880769	0.7576840206777620	0.5953971225833600
0.3200636001548041	0.7739825082397767	0.4652467107858477
0.5058691363670089	0.7689341541892555	0.2731948764913261
0.2358881077601929	0.3319200294640933	0.5081856466901387
0.2678199526406895	0.2512605849138061	0.5828460369983922
0.6873108242931858	0.4154368830947213	0.2668331383603217
0.6634416126377253	0.6778899170635976	0.2886089088773651
0.8129294246945696	0.2685078357448344	0.6603907782979878
0.6508895302521391	0.3048816680422137	0.5832798585162403
0.7601286462860688	0.9717893471026172	0.5819568244238479
0.5487753379309450	0.3209932447533889	0.4156599886595075
0.9378317702289836	0.8683019244697892	0.6575333398836601
0.5830490772146748	0.6703007688847246	0.4563897547593096
0.8237677770673764	0.4545895147352289	0.3718575068626027
0.2621813642327593	0.8620338374157315	0.5328156800825283
0.9493607156364681	0.0445960282413186	0.4091633776195495
0.0534274958584941	0.6454467373670049	0.5614658673447038
0.3752385583350108	0.6279920836884757	0.5821030193338295
0.6155846326292671	0.9717180782308401	0.5343436116758158
0.3799727666900348	0.5380377354287641	0.3663884186935655
0.3492345631612064	0.9139739318101456	0.2949388299802748
0.5812727452550757	0.4074982410396027	0.5251288073365061
0.0172480563226781	0.9066145394779825	0.2759186363873777
0.6580201295613206	0.1826178213353193	0.6504017278835507
0.8921788074058320	0.3323732321228144	0.5172864302215353
0.8170813444779673	0.3920871040896113	0.5935169533060323
0.5792161908438215	0.8060643587584064	0.5082012248932476
0.3671018696794435	0.0292497790914370	0.6426577768619278
0.0798099152190049	0.8133190869194895	0.5741092926402709

0.2928502929552167	0.1170470020684286	0.3935614072316931
0.1825011756537848	0.5562650904242851	0.3749312332063118
0.4728317409176768	0.0695158049593750	0.4928005483127805
0.7881860747535041	0.7211182306006005	0.4511838702386367
0.1749941143576497	0.9601261330681424	0.4765226155974787
0.1672826084060011	0.2326643213900713	0.4436121601205053
0.0553240753387937	0.3321900603583713	0.4861439538430873
0.7727062850643812	0.0293481250164549	0.4373317473890160
0.2787650628700076	0.7091546069953401	0.3632529514756426
0.1005103467838524	0.3107063495941113	0.2875912263050784
0.7968880600444388	0.1398774285263673	0.2827552475762088
0.5553889798125806	0.1114639472992795	0.2652351992611645
0.6587343301243391	0.8304107276789826	0.4294985306335342
0.0526089776763373	0.6125846985571652	0.4799300279208440
0.0689591193107595	0.7578906703027765	0.6547778544792195
0.5330414852531584	0.2444674416351045	0.4900990469726877
0.0512208098791019	0.6844337672581645	0.3637872007576692
0.6683101343296338	0.6834104824625600	0.3796029292607385
0.7418376112706215	0.1512015336450573	0.5726097968765288
0.3259941603836037	0.5332950624306726	0.5150872328359083
0.5144263350341395	0.3747478947138343	0.2712849921833344
0.3563450135370365	0.2187245597428406	0.4660852136315892
0.8479966517465100	0.4427789039936623	0.2868092409918601
0.5960480517416570	0.5205281879936737	0.6550195653205448
0.1785112208788499	0.4947979546844454	0.6629334044911421
0.4318008780055997	0.3429310748918519	0.3517207835931244
0.3019307449219890	0.5989279321868463	0.4379033504735748
0.1073760013970695	0.1419994250507999	0.2766279494440104
0.1613433336902560	0.7043060601355638	0.4277953047546991
0.1559853472389578	0.4934452113045625	0.5098033269025450
0.5726202889415372	0.5444123620692584	0.2653397182769564
0.5640227452452334	0.1433674420313734	0.5625565755347096
0.3351210803345522	0.0053819219829685	0.4539957856737707
0.9672393771586673	0.4622478225493721	0.6256336556162232
0.3634100755248794	0.4547826211861793	0.2889718655770903
0.6765195344875781	0.5267079118224774	0.3418054168386419
0.8832737065863721	0.6796012821754770	0.6697674598671088
0.6824150834176179	0.4948135579784897	0.5808236284067736
0.6798708104792087	0.0972947881962554	0.3433539754428426
0.0137706695561544	0.4640702650478175	0.2769281386760662
0.1744023814379706	0.3324002113111253	0.6540227367377133
0.8140085904562943	0.7725330667698027	0.3642920639054785
0.2199155066404890	0.9828056195361362	0.3435175598593658
0.7294535345726540	0.9329658283539588	0.3681508530090124
0.1814758728778817	0.4196233183497051	0.5810255471645869
0.5560472086683169	0.5184179526207588	0.4091702797824051
0.2344135750806783	0.1156653955684513	0.5010481263879968
0.2557564530093069	0.1413076962493531	0.6617249255535064
0.8770541791062925	0.6428025791410218	0.5168730502672056
0.2137303882300975	0.6774322827483326	0.5154396280027203
0.8706343267838453	0.8829263388504477	0.4246275180329188
0.5726059708379242	0.6857446255603790	0.6555083602074535
0.6948021896362810	0.3869201372800206	0.6573196423096624
0.6655092538542652	0.4212626240886946	0.4564386091647441
0.2369218091364381	0.4381382941022502	0.4375681234423624
0.2826992403316297	0.8836943265288090	0.6483396832742240
0.5167251994090567	0.9436137076202082	0.2863689342044635
0.8404689862002644	0.0611693372159384	0.5169752739587916
0.4609313166651811	0.9854507685378067	0.5731381789059147
0.7352179216460372	0.8268474825863803	0.2951506472622507
0.1474403531362660	0.0854130717976472	0.6027711958383695
0.0113446440082627	0.1386694026794876	0.4856715045422522
0.5956886107993572	0.9941928078768767	0.4477005292908641
0.5065641383860262	0.5105634715356308	0.5797991375344093
0.6151690507258747	0.0243363965243684	0.6236637128020127
0.9774814066817216	0.4887890243696741	0.5363943211525385
0.4038435027412585	0.3690688261428767	0.5051513915107347
0.2408811269523276	0.8664454398593725	0.4122408771545361
0.4276101465703963	0.8940340088319639	0.5023707309037078
0.7560493335573142	0.9014957232018411	0.4951951946246385
0.6586716578671417	0.2466237517205016	0.2758521538487892
0.9530117118651283	0.0784061709058432	0.2617126115535303
0.3894255299576102	0.3068593074398677	0.6394404697810222
0.0417411837112220	0.2064928849406573	0.6113324891314530
0.2812881949620152	0.5908054159102497	0.3098316758749357
0.5200806650310641	0.4742743443917075	0.3367243340280563
0.0747899059335603	0.2613665886866318	0.6656616997173996

0.2747952101637959	0.2603328374666792	0.6443508568951868
0.2723450502129671	0.8211133721722144	0.6939033329579184
0.6163785978650310	0.7631436406371586	0.6884917697466911

Atomic coordinates for Fig. S31 H2 addition to N products (-0.30 eV)

Ga	Cu	N	H
1.0000000000000000			
15.8199996948240003	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	15.8199996948240003	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	32.7360000610349999	
Ga	Cu	N	H
196	4	2	2
Direct			
0.8669265625134686	0.9742364457124799	0.5128980798256219	
0.4755105393478511	0.7203170888412933	0.4099370444570242	
0.0146697612299844	0.6000667420577437	0.3425265273423736	
0.8083951947196663	0.8060581381214409	0.6505715385908704	
0.6372511845538519	0.7773380514120449	0.6545148758422032	
0.5910173772530790	0.0286418977644566	0.4534893928899802	
0.8820573697809549	0.2195497429327847	0.5775973938012742	
0.5314905146641030	0.6170539817909666	0.5189086442153759	
0.2665374682249290	0.8912033564846238	0.4230662532034393	
0.4358704232726728	0.8949565898494374	0.6580361190189399	
0.4221675134071243	0.5327994497733899	0.6655930552208320	
0.0671741851382908	0.5634104632613803	0.6531218602942084	
0.1643686572321270	0.1864928540482037	0.4399207012343352	
0.0295732654229539	0.1394698479638802	0.5931901664352102	
0.1016523903018132	0.7969626876427858	0.4022654709415264	
0.4669950448193022	0.8652708679865044	0.3624220362556911	
0.7614988131089215	0.9695560925050944	0.6488115713309648	
0.0033822674799122	0.1405044211883484	0.4244055437228542	
0.3919668611442276	0.1505627755744995	0.3090295258233823	
0.7944521420653614	0.1320631898542217	0.3426170535361364	
0.882893938269533	0.4694167637868154	0.3595422116685368	
0.8356338296998262	0.2381521816440623	0.2720943566067545	
0.8976561921087185	0.4663259578808865	0.4569658894673064	
0.9714006931988868	0.8499493951389425	0.2816790166058776	
0.3332870735918859	0.4513824418053302	0.5913455871202477	
0.3084795675505773	0.6773263913111238	0.6694849451497533	
0.7491379438327262	0.8750401018496913	0.2795825197317823	
0.4820995435782068	0.0038127889436896	0.2964651419152562	
0.8577248928588046	0.7790411360201142	0.4274472310138023	
0.0643411300332399	0.2173182997272833	0.6675898411871314	
0.3952091675365415	0.6062823086758132	0.4560762877908450	
0.7673598517761918	0.6282177526083694	0.6494606823708697	
0.2752916198919954	0.3178407800555221	0.3386075125811309	
0.7339512781678881	0.2260923780755172	0.5349366401357045	
0.5758314666992417	0.6133590067001394	0.3732589881172461	
0.2209626941565520	0.6610147246638607	0.5957490570180732	
0.2720501399727673	0.7391043101111228	0.2917604878147153	
0.8887519897558752	0.5183355504627953	0.5700706945355012	
0.1528475701242549	0.8888213465088146	0.4854774151758218	
0.1771923233506047	0.5863871190727094	0.2876156922576001	
0.3994732471416307	0.1624878606825121	0.5419319589424870	
0.0271494468093586	0.9174307438218896	0.3558162167266481	
0.3179512954385708	0.9498647113617261	0.5919180533309690	
0.6367512636651612	0.0756704755474900	0.3261316389976630	
0.7131295674453486	0.7320412082904100	0.5777994269635027	
0.6353883912670838	0.3690270562022306	0.6672222713000256	
0.7332331899317940	0.5029985129400614	0.4305697350538767	
0.9074486689577786	0.6179319555045754	0.4119824554492512	
0.1131101606410072	0.9152457439345688	0.6026598962434577	
0.7798439971486854	0.5672712650753459	0.5029131105264562	
0.1009308823392931	0.7453542559351121	0.3032417369460138	
0.9348978554585533	0.3755286891882923	0.2898102977430000	
0.6771866123462753	0.2136764685875697	0.4025704926327617	
0.8874978780455686	0.8149440309950678	0.5339599964310621	
0.8740838273862745	0.6820282547178618	0.5843236680903392	
0.9925052986627673	0.8243170620774531	0.4675858074935996	
0.4610266625170247	0.3153827623831627	0.5741339146569786	
0.0993186498631653	0.7434713428688219	0.6390357598359645	
0.1068794948868947	0.2488634337190209	0.3613728471339235	
0.0965239379892691	0.3502080469713196	0.5425462971411666	

0.5567685796316797	0.2244806281206903	0.3419801503532121
0.2980478384140234	0.4642614778686628	0.2826361133221815
0.3997429138478893	0.2415108105375513	0.3904710854443517
0.0640922996513398	0.4256175245422879	0.3502173553086791
0.7940165581101699	0.3486980672993321	0.4082354989269112
0.0590952855093174	0.5343045513293365	0.4175622923080615
0.5013532738362546	0.0789777742567007	0.3803240044545910
0.3451645071235806	0.9926167696171866	0.3599691651656969
0.7528092675187099	0.4069425032305254	0.5290102604046013
0.5389595073032033	0.4624962789923919	0.6100284364429883
0.9807407793227068	0.1026083974582381	0.3481038178121728
0.3266734714382523	0.3019137966344692	0.2552784525570441
0.2389327881106456	0.5388723600330837	0.4396081460595105
0.9566456096370852	0.6694324022521843	0.2643838647171392
0.9072144661191758	0.2609055587771511	0.3540298006926494
0.9023325767506718	0.3669178396897845	0.6138957240035023
0.5449448131330841	0.2331826572879500	0.6416434091697795
0.0954205268747121	0.0165011675245348	0.5371634739540168
0.6497309143442381	0.7331465315182994	0.3278759285710233
0.1358942305510541	0.0120182644749338	0.4131490010526517
0.2167459350479608	0.8724238369196318	0.3440519437262198
0.5444831367276288	0.7299737943076967	0.5811511068035782
0.5384074844211972	0.3390044348868399	0.4030451485788298
0.0604425848339837	0.3970107315196587	0.6239999330844539
0.8739726413449789	0.0917027024098064	0.6418990170060386
0.3450617543396181	0.8738127863903925	0.5011195308380416
0.4817477831399863	0.8871565040011203	0.5656968445272795
0.4547321642065591	0.7036769459496197	0.3199661698956094
0.3818666579688929	0.8641184607753598	0.2874689109208505
0.1345010179745327	0.9168829394381435	0.2726542943712733
0.8727166467737199	0.9837273028916179	0.3205266513760471
0.8773825202205622	0.9599838906356096	0.2341170194861175
0.8336927874231722	0.1322650318172574	0.4232131736990833
0.7744354602109114	0.0728609317883717	0.5717733310366790
0.9471944825364605	0.9876579755976431	0.5874541033332119
0.3652621709245967	0.7763291465427866	0.6007629351057396
0.2531696377567433	0.7266786424086830	0.4545886342674776
0.6892704352379890	0.7119590928417244	0.2447314499481943
0.2837293474705791	0.2960918156976873	0.5616569275695179
0.2708127481212569	0.1334974717153457	0.5931699475986424
0.5951820138976792	0.4004365903437809	0.2861370221614016
0.8184333566169760	0.7195310335855112	0.3059015119568115
0.9035014554572831	0.2415774943815855	0.6718058726909468
0.6421477122758507	0.3278082939119042	0.5821194371492208
0.7492211565020213	0.8978389573462119	0.5726848305127723
0.6046865627535851	0.1949833365721845	0.4762391778704542
0.9613308479618624	0.8291843938767059	0.6096736195452356
0.6363139752621144	0.6337981137266426	0.4573256207369925
0.7295736061381516	0.3098737574955534	0.3324385609025079
0.2642533596637448	0.0310251320658870	0.5245946249102609
0.8912037558005281	0.9629643096684419	0.4095545985506181
0.0265062954889493	0.5116557667101113	0.5126992988612999
0.3378453528964281	0.6855408157529278	0.5269091623493587
0.6172681114498801	0.0009987067205789	0.5419445928399539
0.3923781121291844	0.5193346043806277	0.3832480958378534
0.2811609931156542	0.0115102346899552	0.2796852374440615
0.5721901628629756	0.4431650140391681	0.5272030163714615
0.0143411137955319	0.0471964338917073	0.2680001236572829
0.7436194570310570	0.2334673524161110	0.6348815060145182
0.8435467177921503	0.2672130676383901	0.4757830929202799
0.8058502811251861	0.3782861604007138	0.6888801957524238
0.4760168166560194	0.7688461041563126	0.4897473572182180
0.3280690065913883	0.0353093763463928	0.6671736074608954
0.0641414651281778	0.7714131178345975	0.5418706211198037
0.2623215913629966	0.1439282564314371	0.3703030206561196
0.2229364595256277	0.4813923964665845	0.3607612105218166
0.4277598348220320	0.9557696073350568	0.4342732921600215
0.7568128681764983	0.7345973276822045	0.4929642502032786
0.0101252478458732	0.9927375160894228	0.4674905702579439
0.2511382369784196	0.4292155983556042	0.5096930853874205
0.9835467772379052	0.3466804931354494	0.4123307018245063
0.7437178044246390	0.0818302089498488	0.4884482898531776
0.3210000958856088	0.7457364595634913	0.3776796759785394
0.1389789042535960	0.3625379597044038	0.2797066148413849
0.7669412997756977	0.0791254231515369	0.2613948296295852
0.6251542381694624	0.9793636368321607	0.2538444622426040
0.6905736227476562	0.7534261798968638	0.4070854587838476

0.0856684273746328	0.6736281665398322	0.4636973095677611
0.0380123938952986	0.6224290261601426	0.5764040842005397
0.4804435718037399	0.3107071242885235	0.4914959117883878
0.9496215959064993	0.7553745983988696	0.3572148638270833
0.7696721482543439	0.6164358689542381	0.3661592271112604
0.6419591442902373	0.0940216227122131	0.6295165496856160
0.4090837092622411	0.4914322125859193	0.5184241455326207
0.4939972483768807	0.2617081642910529	0.2640108728481899
0.3028284295051863	0.2507131319145618	0.4817947955935200
0.8017183160502512	0.5308101641858998	0.2791885388825768
0.6020491024430821	0.5943364880855394	0.6496984260963981
0.2343657021820124	0.5267932393050581	0.6584315172653274
0.4364095371323768	0.3635673125909120	0.3273538424603396
0.1898721538645760	0.6004136932707338	0.5172656685174437
0.2117117760855155	0.1829612631281155	0.2862342786244550
0.1731906793782657	0.6512429788875951	0.3747487714678130
0.1144653335644062	0.4048917390575637	0.4616304901265115
0.6080365182107718	0.5762701029851959	0.2849928535173542
0.5702887704436024	0.1691336545111854	0.5580133014731387
0.4413038166231068	0.1475814643294813	0.4556485905066197
0.8984626394612586	0.5145911832644300	0.6621489994817512
0.4466619006435814	0.5374934093105534	0.2985693107364945
0.6892295583238376	0.4701953214067261	0.3506903559835501
0.9399037979988609	0.6928895247377320	0.6670228409285519
0.6695060789992748	0.5699479513200882	0.5656714539391166
0.6249924507921500	0.9052542813461325	0.3429660603882899
0.0265196078886694	0.5134620204868910	0.2701851416894693
0.2421052621568454	0.3662963004687400	0.6613651901364906
0.7938230667439341	0.8562186253807869	0.3598811182699980
0.1418253918505325	0.0474146622707268	0.3325649575116355
0.7151064885420148	0.0078879376200917	0.3949847853747452
0.1635212129783579	0.4940167443060277	0.5797265360765019
0.5414630165303773	0.4960580244890576	0.4385086460660736
0.1464453217761058	0.1785847810230312	0.5256050139459302
0.3810803627055610	0.1967821476863901	0.6480061963436987
0.9255817486606916	0.6535300287025776	0.4961138432978769
0.2244330216134210	0.8228905030238459	0.5561193269190723
0.7453116032528586	0.9048511228696374	0.4624988602437221
0.4753254627963577	0.7122083547392534	0.6625150211726868
0.7456245066153646	0.4557393854747259	0.6150077064270518
0.6548618362159347	0.3594926570339340	0.4635390366978982
0.2312079210306204	0.3383233995238988	0.4152690403902118
0.2368378310777153	0.8585605607046415	0.6698820832540469
0.5533823981302591	0.8204043790488503	0.2697014443867451
0.9526200408551860	0.1267259393861097	0.5152742986414293
0.4681711181030190	0.0547952187549907	0.6074968325948938
0.8495860542454299	0.7821882520746001	0.2227888757206963
0.1609660244400988	0.0559918258050811	0.6417266744572777
0.0223564497050588	0.2627638850691000	0.4802820171645926
0.5738385019578588	0.8597560859720900	0.4333277051974262
0.4198548802662702	0.6055714001348782	0.5889485870941227
0.5940509522040761	0.9313523203074702	0.6269545766949484
0.9243533180025477	0.3686371216000016	0.5315078335273182
0.3786033338516471	0.3992205752119573	0.4431645873872549
0.2892950521036301	0.0671928015415470	0.4464649520553046
0.4521705404187416	0.0139144242572383	0.5127566732891415
0.6251154015060594	0.8332597140655669	0.5175311344193835
0.6549591920953988	0.2185331646451581	0.2687336888145100
0.0296324875080092	0.2170129460825636	0.2844766625000649
0.4318502248204775	0.3748818723499717	0.6455755862376453
0.1522521766120198	0.2435760388661911	0.5963005961084999
0.3130370263307403	0.6100339484095056	0.3335995545259433
0.5330162454832449	0.4679446259431531	0.3583193962545251
0.1361363122528809	0.3106560462351066	0.6486982106402275
0.3451559756845514	0.3040082546618285	0.6752991624702007
0.3557798820689041	0.3027214079443660	0.7061999540511710
0.1234619604811358	0.1313084310910086	0.6834870225229743