

**Table S1:** Supercell lattice constants ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ , and  $\gamma$ ) and atomic fractional coordinates optimized with optB88-vdW from Fig. 1(a).

$a = b = 5.6301 \text{ \AA}; c = 27.7909 \text{ \AA}; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 60^\circ$							
	x	y	z		x	y	z
O	0.50026	0.50008	0.45864	Pt	0.00115	0.00104	0.24802
Pt	0.00000	0.00000	0.00000	Pt	0.49812	0.00107	0.24804
Pt	0.50000	0.00000	0.00000	Pt	0.00117	0.49803	0.24803
Pt	0.00000	0.50000	0.00000	Pt	0.50019	0.50006	0.24816
Pt	0.50000	0.50000	0.00000	Pt	0.66672	0.66647	0.33023
Pt	0.66667	0.66667	0.08271	Pt	0.16764	0.66648	0.33021
Pt	0.16667	0.66667	0.08271	Pt	0.66672	0.16740	0.33021
Pt	0.66667	0.16667	0.08271	Pt	0.16699	0.16677	0.33468
Pt	0.16667	0.16667	0.08271	Pt	0.83368	0.83345	0.41207
Pt	0.83333	0.83333	0.16541	Pt	0.32733	0.84612	0.41693
Pt	0.33333	0.83333	0.16541	Pt	0.84635	0.32710	0.41694
Pt	0.83333	0.33333	0.16541	Pt	0.32735	0.32712	0.41690
Pt	0.33333	0.33333	0.16541				

**Table S2:** Supercell lattice constants ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ , and  $\gamma$ ) and atomic fractional coordinates optimized with optB88-vdW from Fig. 1(b).

$a = b = 4.8758 \text{ \AA}; c = 27.7909 \text{ \AA}; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 30^\circ$							
	x	y	z		x	y	z
H	0.58444	0.16437	0.49950	Pt	0.00000	0.33333	0.16541
H	0.24010	0.16482	0.49961	Pt	0.66667	0.66667	0.16541
H	0.10223	0.54580	0.50053	Pt	0.00002	0.00243	0.24790
O	-0.01061	0.32024	0.49160	Pt	0.66772	0.33653	0.24809
O	0.34743	0.03535	0.49414	Pt	0.33368	0.66949	0.24785
Pt	0.00000	0.00000	0.00000	Pt	0.32799	0.33304	0.33035
Pt	0.66667	0.33333	0.00000	Pt	0.66634	0.00595	0.33066
Pt	0.33333	0.66667	0.00000	Pt	0.00285	0.66950	0.33082
Pt	0.33333	0.33333	0.08270	Pt	0.32599	-0.00576	0.41439
Pt	0.66667	0.00000	0.08270	Pt	-0.00530	0.33005	0.41574
Pt	0.00000	0.66667	0.08270	Pt	0.66098	0.66359	0.41154
Pt	0.33333	0.00000	0.16541				

**Table S3:** Supercell lattice constants ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ , and  $\gamma$ ) and atomic fractional coordinates optimized with optB88-vdW from Fig. 1(c).

$a = b = 8.4451 \text{ \AA}; c = 27.7909 \text{ \AA}; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 60^\circ$											
	x	y	z		x	y	z		x	y	z
H	0.00183	0.42342	0.49905	Pt	0.44444	0.55556	0.08271	Pt	0.00018	1.00005	0.24765
H	0.77318	0.30828	0.49890	Pt	0.44444	0.88889	0.08271	Pt	0.00030	0.33425	0.24764
H	0.20044	0.23081	0.49871	Pt	0.77778	0.22222	0.08271	Pt	0.99978	0.66687	0.24817
H	0.08550	0.00203	0.49904	Pt	0.77778	0.55556	0.08271	Pt	0.33338	0.00061	0.24813
H	0.88782	0.69667	0.50339	Pt	0.77778	0.88889	0.08271	Pt	0.33398	0.33424	0.24814
H	0.46962	0.11289	0.50298	Pt	0.22222	0.11111	0.16541	Pt	0.33340	0.66693	0.24812
H	0.30786	0.53326	0.50284	Pt	0.22222	0.44444	0.16541	Pt	0.66615	0.00019	0.24760
H	0.57735	0.91687	0.49876	Pt	0.66667	0.00000	0.00000	Pt	0.66603	0.33386	0.24816
H	0.69285	0.80344	0.49871	Pt	0.66667	0.33333	0.00000	Pt	0.66663	0.66638	0.24815
O	0.56873	0.79350	0.49338	Pt	0.66667	0.66667	0.00000	Pt	0.11346	0.22448	0.32976
O	0.19797	0.42313	0.49137	Pt	0.11111	0.22222	0.08271	Pt	0.11054	0.55489	0.33087
O	0.57931	0.11263	0.49136	Pt	0.11111	0.55556	0.08271	Pt	0.10968	0.89054	0.33082
O	0.88820	0.80627	0.49146	Pt	0.11111	0.88889	0.08271	Pt	0.44359	0.22109	0.33130
O	0.20911	0.11579	0.49353	Pt	0.44444	0.22222	0.08271	Pt	0.44289	0.55747	0.33120
O	0.88740	0.43219	0.49364	Pt	0.44444	0.55556	0.08271	Pt	0.44600	0.89115	0.33073
Pt	0.00000	0.00000	0.00000	Pt	0.44444	0.88889	0.08271	Pt	0.77644	0.22463	0.32972
Pt	0.00000	0.33333	0.00000	Pt	0.77778	0.22222	0.08271	Pt	0.78008	0.55816	0.33133
Pt	0.00000	0.66667	0.00000	Pt	0.77778	0.55556	0.08271	Pt	0.77640	0.88760	0.32977
Pt	0.33333	0.00000	0.00000	Pt	0.77778	0.88889	0.08271	Pt	0.22552	0.11434	0.41452
Pt	0.33333	0.33333	0.00000	Pt	0.22222	0.11111	0.16541	Pt	0.21987	0.44566	0.41549
Pt	0.33333	0.66667	0.00000	Pt	0.22222	0.44444	0.16541	Pt	0.22187	0.78027	0.41229
Pt	0.66667	0.00000	0.00000	Pt	0.22222	0.77778	0.16541	Pt	0.55650	0.11315	0.41548
Pt	0.66667	0.33333	0.00000	Pt	0.55556	0.11111	0.16541	Pt	0.55523	0.44698	0.41254
Pt	0.66667	0.66667	0.00000	Pt	0.55556	0.44444	0.16541	Pt	0.55227	0.77682	0.41441
Pt	0.11111	0.22222	0.08271	Pt	0.55556	0.77778	0.16541	Pt	0.88859	0.11354	0.40955
Pt	0.11111	0.55556	0.08271	Pt	0.88889	0.11111	0.16541	Pt	0.88781	0.44998	0.41461
Pt	0.11111	0.88889	0.08271	Pt	0.88889	0.44444	0.16541	Pt	0.88915	0.78219	0.41561
Pt	0.44444	0.22222	0.08271	Pt	0.88889	0.77778	0.16541				

**Table S4:** Supercell lattice constants ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ , and  $\gamma$ ) and atomic fractional coordinates optimized with optB88-vdW from Fig. 1(d).

$a = b = 2.8150 \text{ \AA}; c = 27.7909 \text{ \AA}; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 60^\circ$			
	x	y	z
H	0.51149	0.52149	0.49579
O	0.32012	0.32326	0.48559
Pt	0.00000	0.00000	0.00000
Pt	0.66667	0.66667	0.08271
Pt	0.33333	0.33333	0.16541
Pt	0.01275	0.01264	0.24841
Pt	0.68721	0.68821	0.33166
Pt	0.31949	0.32210	0.41411