

Table S1: Structural parameters

Harmonic vibrational frequencies (in cm ⁻¹)									
OH + acetone				OH + acetone-d6					
MC1a	TS1a	MC1b	TS1b	MC1a	TS1a	MC1b	TS1b	MC2	TS2
3509	3584	3641	3640	3509	3583	3641	3640	3572	3602
3109	3102	3101	3112	2308	2301	2302	2317	3104	3119
3105	3097	3100	3109	2303	2298	2300	2308	3096	3109
3061	3059	3064	3065	2265	2264	2268	2268	3072	3081
3054	3016	3058	3022	2260	2190	2263	2195	3055	3075
2978	2974	2977	2977	2140	2137	2138	2143	2979	2987
2973	1706	2973	2135	2137	1697	2136	2117	2973	2981
1691	1497	1705	1458	1681	1244	1695	1240	1693	1568
1468	1456	1472	1453	1255	1184	1244	1086	1468	1471
1453	1447	1456	1415	1092	1075	1086	1066	1454	1453
1447	1423	1454	1401	1060	1051	1060	1052	1448	1452
1446	1366	1448	1367	1049	1042	1050	1043	1445	1445
1377	1236	1371	1250	1044	1015	1049	1015	1372	1377
1370	1175	1363	1204	1042	949	1045	968	1364	1370
1233	1093	1218	1114	1006	939	996	939	1226	1232
1093	1070	1095	1054	955	841	953	864	1089	1061
1062	941	1060	960	877	825	875	829	1056	1031
888	890	884	862	710	707	706	716	909	941
873	850	874	812	693	685	684	683	867	880
782	780	775	784	663	653	663	668	776	856
534	688	508	692	613	626	458	578	517	781
531	504	468	492	489	466	390	446	509	503
522	465	366	491	478	428	308	413	464	480
464	429	167	356	390	387	127	305	381	387
374	322	119	320	316	288	108	247	365	304
166	237	99	133	163	180	86	123	161	257
128	173	91	123	106	166	77	101	141	246
78	123	70	91	102	90	67	84	104	224
45	39	51	47	65	35	47	43	75	180
36		14		29		13		11	
Rotational constants (in cm ⁻¹)									
0.0623	0.0753	0.0599	0.0754	0.0556	0.0668	0.0561	0.0695		0.1315
0.0759	0.0940	0.0671	0.0923	0.0684	0.0831	0.0649	0.0873		0.1568
0.3080	0.3186	0.2043	0.2440	0.2442	0.2620	0.1617	0.1920		0.1630

Electronic Supplementary Material for PCCP
This journal is ©The Owner Societies 2006