

Electronic Supplementary Information 2

Adsorption and transformations of ethene on hydrogenated rhodium clusters in faujasite-type zeolite. A computational study

Velina K. Markova,^a Georgi N. Vayssilov,^{a*} Alexander Genest,^b
and Notker Rösch,^{b,c*}

^a Faculty of Chemistry and Pharmacy, University of Sofia,
Blvd. J. Baucher 1, 1126 Sofia, Bulgaria

^b Institute of High Performance Computing, Agency for Science,
Technology and Research, 1 Fusionopolis Way, #16-16
Connexis, Singapore 138632, Singapore

^c Department Chemie and Catalysis Research Center, Technische
Universität München, 85747 Garching, Germany

Cartesian coordinates of the most stable complexes of the organic
intermediates (di- σ -ethene, π -ethene, ethyl, ethylidene, vinyl, ethylidyne,
vinylidene) for each hydrogen loading on Rh₃ and Rh₄ clusters

Rh₃

di- σ -C₂H₄/HRh₃

154

generated by VMD

H	19.543730	9.632646	5.067783
H	21.872452	11.226789	6.146357
H	19.872580	10.074733	6.818121
H	21.566162	10.776782	4.406828
H	23.108572	9.463037	7.180813
O	19.158464	16.769640	14.107221
O	19.877476	5.794467	7.062481
O	23.323914	8.586919	3.221287
O	15.493515	3.934006	11.121383
O	8.645272	7.096369	11.109027
O	17.326874	12.792650	3.010244
O	16.647547	17.503233	7.076733
O	17.955763	7.485305	0.061401
O	24.133377	16.017015	2.896306
O	14.818022	11.431642	11.218465
O	10.523780	3.155674	0.075577
O	28.457102	14.318957	7.060984
O	15.503421	3.085495	0.022304
O	14.829222	14.223544	7.073450
O	11.167939	11.355803	11.032709
O	19.184950	16.004208	2.979580
O	8.656178	12.811782	3.022755
O	17.293360	7.087858	11.106115
O	26.597345	17.362297	7.061050
O	16.755404	12.385233	13.956359
O	19.165356	18.880465	11.138179
O	19.885851	8.537498	2.821191
O	24.109901	16.760008	14.074462
O	6.226917	5.466300	7.020525

O	19.935961	19.290487	13.657720
O	21.715567	4.545219	5.286069
O	21.693731	6.578143	2.588335
O	23.366922	19.291067	13.654268
O	26.719154	7.559232	13.644439
O	16.618364	15.332263	2.617346
O	14.913470	16.332354	5.429920
O	28.376131	10.582045	13.590384
O	26.700314	15.337263	2.557467
O	14.871737	10.498490	13.724038
O	16.634306	7.561835	13.653765
O	28.404005	16.375002	5.364323
O	19.740208	3.609112	8.593801
O	7.926197	12.273164	0.507079
O	6.374253	9.217471	0.645607
O	18.057194	4.563847	11.537449
O	12.996490	15.266665	8.713205
O	11.273945	0.620249	0.440120
O	14.674781	0.555858	0.390487
O	12.923334	13.301517	11.519039
O	6.209008	3.519093	8.822818
O	19.762829	9.461679	0.330042
O	18.003677	12.346195	0.457838
O	7.930244	4.551224	11.480029
O	11.065727	13.406895	2.008620
O	18.918379	3.863713	5.081843
O	6.925233	6.377080	1.986343
O	14.896174	6.369120	12.060079
O	11.048192	6.329832	12.013858
O	14.926361	13.402191	1.997018
O	6.925770	3.855227	5.030398
O	19.179197	6.094796	1.985920
O	17.253822	2.781232	2.025885
O	12.981688	9.676181	12.062909
O	8.745274	2.758570	2.045815
O	12.982388	14.553420	5.158331
O	21.677738	5.388429	8.988590
O	17.390745	17.135614	12.135934
O	21.686876	10.293793	1.941203
O	25.872734	17.136036	12.088223
O	27.854694	16.069822	9.022799
O	19.706892	6.554032	12.122710
O	23.579638	13.534584	2.074514
O	15.402593	13.862331	12.181276
O	15.527361	15.978289	8.972723
O	27.694357	13.683905	12.058823
O	19.717154	13.557635	2.052862
O	23.568129	6.498448	12.071995
O	12.989417	12.460420	0.458269
O	19.816059	6.564632	4.525333
O	6.246971	6.345779	4.540407
O	12.987936	4.576139	11.619880
O	10.497173	8.881433	11.594990
O	15.469756	13.864308	4.547784
O	8.701447	1.962487	4.591463
O	17.325562	4.943752	0.479529
O	17.235386	1.893473	4.567053
O	15.486556	8.921575	11.652117
O	8.652217	4.938916	0.568380
O	10.495062	13.896586	4.541995
O	19.183102	6.036941	9.598450

O	17.344746	14.933433	13.620755
O	24.154278	11.006383	2.596686
O	26.022718	17.911011	9.565741
O	28.467674	13.534770	9.545631
O	21.659985	7.455319	13.652405
O	21.658405	15.304391	2.461643
O	14.805497	13.515063	9.616027
O	17.334042	17.818224	9.584001
O	25.944313	14.953101	13.590367
O	19.183575	11.012918	2.450344
O	24.163990	6.037834	9.530521
Al	20.067894	5.070145	5.445433
Si	11.457060	12.989339	0.492152
Si	5.863969	6.924721	3.073225
Si	14.522120	4.788564	12.112819
Si	9.890462	7.462955	12.096868
Si	16.082043	13.850195	3.045019
Si	7.453259	2.409449	5.534980
Si	18.541136	6.023816	0.496155
Si	17.004019	1.511029	3.014807
Si	14.534383	10.134317	12.163112
Si	8.974684	3.347905	0.551035
Si	11.418876	14.798476	5.531952
Si	20.108273	5.201739	8.554047
Si	17.623377	16.534180	13.623450
Si	23.220263	9.789913	2.079997
Si	25.697252	18.395031	11.077363
Si	28.774418	14.806125	8.580699
Si	20.117266	6.945093	13.641425
Si	23.184322	15.105706	1.950308
Si	14.485827	13.025176	11.130842
Si	16.088499	17.456318	8.604260
Si	27.166660	13.885878	13.576694
Si	18.548756	12.436032	1.992129
Si	24.748247	6.037781	11.051911
Si	23.186090	6.896852	13.602739
Si	14.538334	14.748678	8.589992
Si	28.735374	12.970873	11.039855
Si	20.121515	15.126047	1.980948
Si	24.756401	12.420364	2.048245
Si	18.557150	6.055110	11.092193
Si	27.224752	17.496468	8.551041
Si	16.135355	13.855314	13.628455
Si	17.623503	18.354000	11.086777
Si	20.128220	9.826283	1.875630
Si	25.648050	16.549583	13.583760
Si	23.228897	5.102394	8.565779
Si	14.543972	14.747569	5.552841
Si	17.037521	3.341960	0.517061
Si	11.420699	10.125767	12.072659
Si	8.974382	1.508319	3.058040
Si	5.883603	5.033204	5.476784
Si	14.524134	12.985901	0.481138
Si	11.449848	4.761003	12.108712
Si	20.139204	6.940378	2.988422
Si	18.466928	2.399306	5.513206
Si	7.468094	6.040897	0.492438
Si	16.078260	7.482113	12.119224
Si	9.898117	13.873001	3.036285
Rh	20.756525	7.759081	6.283384
Rh	22.285374	8.226138	7.986482

Rh	22.856905	8.887106	5.562766
C	20.299623	9.738832	5.860992
C	21.543657	10.437451	5.455103

di- σ -C₂H₄/H₃Rh₃

156

generated by VMD

H	21.677893	8.010105	8.304795
H	21.362198	7.682858	5.325173
H	19.693398	10.222698	6.109003
H	22.620646	11.014646	6.106122
H	20.764765	10.529928	7.567731
H	21.528809	10.766010	4.657736
H	23.157366	9.442977	8.061072
O	19.145769	16.759071	14.055569
O	19.972118	5.867675	7.114587
O	23.377926	8.545132	3.066149
O	15.445659	3.918965	11.063167
O	8.642995	7.043977	11.024766
O	17.298124	12.810714	2.961556
O	16.733646	17.350624	7.039836
O	17.924862	7.440444	-0.137143
O	15.454412	1.016658	2.857302
O	14.846375	11.389954	11.109921
O	10.494729	3.168431	-0.014787
O	11.116669	14.353658	7.031517
O	15.464155	3.078289	0.010245
O	14.829495	14.277506	7.026581
O	11.096387	11.372541	11.008439
O	19.162319	16.005188	2.982885
O	8.626558	12.794994	3.017432
O	17.259428	7.030340	11.082961
O	26.514894	17.165468	7.047915
O	16.681627	12.401033	13.991712
O	19.127085	18.879250	11.138674
O	19.850874	8.542422	2.879270
O	24.094341	16.726957	14.112364
O	6.044721	5.641258	7.048985
O	19.908970	19.293459	13.653022
O	21.674229	4.601527	5.243749
O	21.623220	6.567484	2.607356
O	23.366138	19.248718	13.610723
O	26.668423	7.565290	13.553964
O	16.600164	15.358174	2.570865
O	14.883949	16.378716	5.372469
O	28.357944	10.495018	13.525303
O	26.681423	15.320249	2.552055
O	14.834683	10.494289	13.623671
O	16.593407	7.544890	13.613794
O	28.374771	16.377001	5.295757
O	19.601995	3.585078	8.484770
O	7.932680	12.304651	0.479891
O	6.265813	9.279993	0.506728
O	18.016041	4.500588	11.500762
O	12.998029	15.292902	8.684014
O	11.250198	0.645006	0.450420
O	14.627867	0.549198	0.368100
O	12.947212	13.235897	11.480783
O	6.279989	3.500278	8.639549
O	19.724569	9.392206	0.357727

O	17.995922	12.345147	0.417353
O	7.874602	4.514229	11.430945
O	11.028028	13.373544	1.987718
O	18.887793	3.880372	5.302948
O	6.823518	6.241920	1.939073
O	14.849982	6.342055	12.033891
O	11.039686	6.326253	11.987388
O	14.888738	13.431960	1.976078
O	6.921988	3.918724	5.218736
O	19.142025	6.169704	1.856515
O	17.270020	2.761217	1.953604
O	12.957657	9.680569	11.937064
O	8.758061	2.771927	1.979511
O	12.970483	14.574406	5.115163
O	21.627193	5.143509	9.085019
O	17.354528	17.111685	12.101390
O	21.642836	10.278221	1.956003
O	25.787006	17.104147	12.068959
O	27.848539	16.048605	9.050688
O	19.670296	6.481380	12.111288
O	23.567684	13.539913	2.056527
O	15.442312	13.813879	12.088102
O	15.531703	15.964193	8.988114
O	27.753706	13.772730	12.010798
O	19.696558	13.562637	2.031462
O	23.569645	6.493536	12.057537
O	12.966008	12.454769	0.438375
O	19.613455	6.455724	4.427054
O	6.254523	6.362168	4.511065
O	12.951689	4.540705	11.605145
O	10.476937	8.859213	11.486882
O	15.466925	13.905301	4.513793
O	8.655568	2.045087	4.514370
O	17.289703	4.938045	0.414531
O	17.228825	1.957828	4.508531
O	15.457270	8.878412	11.583793
O	8.612370	4.936548	0.479752
O	10.487940	13.874362	4.524833
O	19.153063	5.990479	9.590943
O	17.305050	14.931807	13.606833
O	24.131393	10.993564	2.515342
O	25.945467	17.835011	9.537257
O	28.509352	13.514675	9.495563
O	21.630554	7.448366	13.599656
O	21.641979	15.300944	2.463704
O	14.785270	13.489388	9.538487
O	17.353352	17.803045	9.550653
O	25.939100	14.940871	13.568400
O	19.147356	11.015248	2.427304
O	24.104195	6.011226	9.508533
Al	20.025339	5.147839	5.483095
Si	11.431699	12.977470	0.469935
Si	5.810637	6.890425	3.018205
Si	14.489771	4.758173	12.078819
Si	9.871430	7.452123	12.022068
Si	16.062941	13.877202	3.004741
Si	7.449747	2.417892	5.531102
Si	18.512844	6.011230	0.385840
Si	17.000500	1.520361	2.973987
Si	14.516171	10.110890	12.064382
Si	8.951242	3.349980	0.477662

Si	11.404737	14.809768	5.493256
Si	20.076799	5.143037	8.557220
Si	17.602098	16.529274	13.595203
Si	23.184536	9.790903	1.988500
Si	25.637468	18.349115	11.040856
Si	28.779438	14.813274	8.557513
Si	20.090233	6.935086	13.607029
Si	23.164511	15.109870	1.934140
Si	14.502190	12.982096	11.053480
Si	16.140850	17.402767	8.551943
Si	27.165560	13.880178	13.520092
Si	18.528463	12.439896	1.957289
Si	24.722321	6.015498	11.024955
Si	23.155916	6.890743	13.580004
Si	14.532063	14.757325	8.554394
Si	28.744610	12.974456	11.003360
Si	20.103458	15.131859	1.981806
Si	24.740152	12.421423	2.017334
Si	18.520889	5.995330	11.078332
Si	27.144707	17.422155	8.520573
Si	16.089628	13.858808	13.574336
Si	17.597712	18.334213	11.063056
Si	20.083509	9.800167	1.895915
Si	25.620499	16.531301	13.574962
Si	23.155731	5.052162	8.573911
Si	14.528696	14.787852	5.506265
Si	17.011499	3.338041	0.458428
Si	11.390310	10.105406	11.990167
Si	8.957502	1.533346	3.008075
Si	5.824230	5.089224	5.488462
Si	14.503570	12.970592	0.468240
Si	11.421945	4.754267	12.100863
Si	20.047491	6.922410	2.974422
Si	18.431570	2.382036	5.530321
Si	7.404018	6.013760	0.439306
Si	16.040300	7.445931	12.079920
Si	9.873465	13.852852	3.025420
Rh	20.672155	8.047757	6.859863
Rh	23.200300	7.955109	7.662887
Rh	22.718039	8.602948	5.329271
C	20.691200	10.077653	6.567000
C	21.821293	10.399339	5.656617

di- σ -C₂H₄/H₅Rh₃

158

generated by VMD

H	23.920273	8.916391	6.407968
H	21.617607	8.199337	8.169745
H	23.384142	9.506971	8.218331
H	21.565315	7.433405	5.718563
H	19.490236	10.144044	6.491324
H	22.258141	11.129642	5.849576
H	20.846548	10.457618	7.687398
H	20.964323	10.623156	4.653309
H	24.932650	8.268629	7.886427
O	19.132240	16.752321	14.048300
O	19.930185	5.820265	7.114302
O	23.344095	8.547313	3.039584
O	15.429623	3.904067	11.061877

O	8.626692	7.036915	11.018831
O	17.284246	12.803171	2.957904
O	16.725658	17.318922	7.021549
O	26.573681	12.429318	14.014537
O	15.438363	1.004552	2.855100
O	14.813410	11.383546	11.096180
O	10.483843	3.159062	-0.026123
O	11.112211	14.318972	7.018686
O	15.447422	3.082864	0.010587
O	14.801945	14.289879	7.011949
O	11.094184	11.361824	11.022425
O	19.148703	16.006662	2.966768
O	8.612487	12.792098	2.996978
O	17.253403	7.024243	11.071871
O	26.491060	17.194057	7.036114
O	16.681171	12.397898	13.955610
O	19.115358	18.885223	11.114973
O	19.880768	8.548980	2.877719
O	15.422869	11.724682	-0.033010
O	6.036820	5.669893	7.041171
O	19.891651	19.284714	13.635401
O	21.680336	4.594064	5.251968
O	21.622120	6.551664	2.583048
O	23.349478	19.247129	13.605747
O	26.644108	7.546289	13.554960
O	16.592913	15.348366	2.546011
O	14.856992	16.390068	5.352707
O	28.362558	10.498307	13.547998
O	26.667437	15.317903	2.537223
O	14.833030	10.486586	13.609512
O	16.580940	7.545309	13.599243
O	28.356932	16.365978	5.310642
O	19.607325	3.540826	8.498477
O	7.919928	12.313640	0.454556
O	6.251131	9.262389	0.476833
O	17.994986	4.490937	11.511155
O	12.968449	15.285771	8.683124
O	11.243746	0.636452	0.437493
O	14.613973	0.549840	0.364998
O	12.931104	13.244230	11.474723
O	6.277727	3.495233	8.599850
O	19.710327	9.388007	0.348850
O	17.979240	12.332134	0.412558
O	7.858521	4.507719	11.405429
O	11.016079	13.374637	1.974265
O	18.883375	3.870086	5.252481
O	6.832448	6.255458	1.914639
O	14.844028	6.335174	12.021015
O	11.024618	6.326610	11.982244
O	14.876749	13.420997	1.968397
O	6.926486	3.928634	5.225500
O	19.123756	6.170272	1.888464
O	17.249491	2.758624	1.955583
O	12.944684	9.660197	11.947729
O	8.740150	2.770478	1.964339
O	12.952968	14.573063	5.092410
O	21.617840	5.132212	9.059319
O	17.353550	17.111660	12.081447
O	21.636625	10.295502	1.919972
O	25.776594	17.087769	12.062383
O	27.800056	16.009554	9.023085

O	19.663143	6.472015	12.099552
O	23.550356	13.531178	2.042374
O	15.435619	13.809974	12.058692
O	15.505438	15.961555	8.981375
O	27.731318	13.757340	12.007827
O	19.678679	13.558452	2.021760
O	23.560486	6.490294	12.057991
O	12.951594	12.450734	0.428234
O	19.661913	6.488710	4.458820
O	6.235571	6.363071	4.485126
O	12.938612	4.543890	11.594965
O	10.452112	8.861946	11.510805
O	15.456010	13.917451	4.502575
O	8.632701	2.038125	4.494287
O	17.291468	4.928900	0.420654
O	17.212687	1.941545	4.504426
O	15.447245	8.874137	11.565112
O	8.613078	4.936123	0.460884
O	10.467369	13.872567	4.511114
O	19.136990	5.953236	9.588470
O	17.288189	14.935252	13.588535
O	24.129566	10.983553	2.480566
O	25.933813	17.830286	9.535440
O	28.490086	13.492259	9.490855
O	21.618822	7.448121	13.590761
O	21.626942	15.291737	2.458418
O	14.759364	13.480971	9.518049
O	17.343584	17.791597	9.530775
O	25.919847	14.927801	13.567892
O	19.138527	11.009763	2.422258
O	24.054558	6.005766	9.513666
Al	20.026699	5.124994	5.470046
Si	11.417279	12.973511	0.457218
Si	5.810503	6.885349	2.992948
Si	14.476137	4.753489	12.071873
Si	9.848959	7.445395	12.021336
Si	16.050760	13.873402	2.993711
Si	7.434380	2.417210	5.517509
Si	18.510809	6.005397	0.406628
Si	16.983078	1.511564	2.967935
Si	14.501682	10.101482	12.053431
Si	8.940894	3.347354	0.462984
Si	11.388873	14.796282	5.484738
Si	20.062906	5.102672	8.560295
Si	17.591139	16.531204	13.576690
Si	23.173590	9.789369	1.952997
Si	25.622150	18.337492	11.040660
Si	28.755949	14.786633	8.546138
Si	20.081400	6.928130	13.595600
Si	23.149059	15.102302	1.927312
Si	14.481347	12.978497	11.036167
Si	16.132011	17.389469	8.531926
Si	27.148289	13.868942	13.518151
Si	18.513208	12.433352	1.951301
Si	24.702671	6.013183	11.012805
Si	23.144987	6.891503	13.576447
Si	14.505016	14.756824	8.543378
Si	28.729586	12.964117	11.002642
Si	20.089756	15.127142	1.970946
Si	24.729296	12.419352	1.993354
Si	18.507555	5.979956	11.076454

Si	27.123569	17.403053	8.514287
Si	16.081520	13.854516	13.545298
Si	17.587770	18.333658	11.040075
Si	20.081219	9.803730	1.879713
Si	25.604269	16.518972	13.569207
Si	23.148970	5.044353	8.550493
Si	14.508234	14.797390	5.489429
Si	16.997002	3.331729	0.458095
Si	11.380222	10.097569	12.009236
Si	8.941342	1.529412	2.989594
Si	5.828969	5.103486	5.486071
Si	14.488858	12.965450	0.459388
Si	11.406881	4.754474	12.086268
Si	20.059790	6.925780	2.982322
Si	18.416498	2.378445	5.517687
Si	7.406241	6.014316	0.414397
Si	16.030739	7.442446	12.064900
Si	9.858871	13.850068	3.009789
Rh	20.595499	7.968081	6.928760
Rh	23.382719	8.069969	7.676503
Rh	22.546316	8.706154	5.250661
C	20.567600	10.023064	6.717669
C	21.470732	10.396696	5.606376

di- σ -C₂H₄/H₇Rh₃

160

generated by VMD

H	21.581078	9.439204	4.438103
H	20.177410	8.189284	8.727223
H	24.063383	8.895791	6.739197
H	21.928665	7.858887	8.513937
H	23.916042	9.065886	8.657900
H	21.123615	8.773480	4.784628
H	19.897377	10.273193	7.355547
H	22.843693	10.970798	7.124404
H	21.171909	10.204300	8.647116
H	21.536051	11.229239	5.881869
H	7.940492	7.859557	7.819593
O	19.098200	16.748943	13.954258
O	20.002880	5.828076	7.089640
O	6.196486	8.480915	2.853077
O	24.047741	18.898685	10.985079
O	8.603306	7.028738	10.905749
O	17.271343	12.846124	2.888412
O	16.695961	17.410490	6.941896
O	26.640898	12.443097	14.029509
O	15.407878	1.014963	2.775621
O	14.771814	11.350872	10.998463
O	19.098555	8.179440	13.984971
O	11.123583	14.335181	6.943427
O	24.047426	8.109540	14.055059
O	14.714426	14.263320	6.926608
O	11.068372	11.354995	10.963877
O	19.107410	15.994977	2.905640
O	25.880722	12.829190	2.964059
O	17.202888	6.986598	11.009871
O	26.408836	17.173237	6.969320
O	16.536209	12.441825	14.070258
O	19.059853	18.880762	11.077745

O	19.620302	8.507108	2.730831
O	24.030781	16.683777	14.058687
O	23.295027	5.566007	6.987757
O	19.863548	19.287577	13.589019
O	21.613501	4.506998	5.186476
O	21.578785	6.716071	2.476100
O	23.310303	19.207819	13.531353
O	26.570166	7.538541	13.455173
O	16.543093	15.380654	2.462325
O	14.837650	16.408810	5.320842
O	28.352791	10.472954	13.489603
O	26.638720	15.340349	2.465684
O	14.782081	10.497958	13.530783
O	16.541565	7.527664	13.539373
O	28.304066	16.407106	5.257981
O	19.571997	3.496752	8.366820
O	7.902182	12.303977	0.421452
O	6.144680	9.423800	0.345380
O	17.928268	4.457808	11.508633
O	12.946904	15.292136	8.650084
O	11.199386	0.672336	0.369043
O	14.577314	0.575346	0.282500
O	12.912826	13.233183	11.402331
O	6.267942	3.464695	8.630339
O	19.733662	9.469744	0.250563
O	17.927055	12.329829	0.342919
O	7.791365	4.503424	11.254240
O	10.943225	13.351148	1.912069
O	18.802526	3.924144	5.256064
O	6.733309	6.039883	1.920129
O	14.798491	6.311607	11.968191
O	10.982109	6.321214	11.919732
O	14.851829	13.420212	1.900765
O	6.883789	3.954608	5.089080
O	19.112211	6.033674	1.869541
O	17.204489	2.771958	1.859782
O	12.912157	9.632819	11.868269
O	8.745989	2.790655	1.883443
O	12.913860	14.634115	4.979549
O	21.567322	5.033038	9.076714
O	17.272570	17.126953	12.035677
O	21.591446	10.156907	2.025794
O	25.700958	17.045313	11.998826
O	27.753391	15.988172	8.948860
O	19.622486	6.446209	12.013731
O	23.502378	13.548111	1.949319
O	15.431168	13.741845	11.999239
O	15.514410	15.926833	8.850522
O	27.708445	13.743959	11.946500
O	19.657597	13.570235	1.914839
O	23.539402	6.503319	11.971103
O	12.906805	12.439464	0.391581
O	19.736715	6.532888	4.429665
O	6.047422	6.416682	4.479431
O	12.890339	4.529037	11.531547
O	10.412845	8.860422	11.437002
O	15.424199	13.949052	4.425555
O	8.598932	2.057353	4.414982
O	17.260782	4.938806	0.317215
O	17.177433	1.990557	4.414736
O	15.413665	8.852345	11.507569

O	8.565608	4.945329	0.354968
O	10.426373	13.909431	4.446120
O	19.048189	5.841351	9.531293
O	17.244202	14.925272	13.519552
O	24.059610	11.006937	2.441632
O	25.915916	17.827276	9.485802
O	28.468390	13.483900	9.422469
O	21.576767	7.456845	13.477391
O	21.591974	15.317948	2.377147
O	14.741579	13.472792	9.448909
O	17.348309	17.737650	9.466950
O	25.901749	14.904724	13.523246
O	19.116827	11.033373	2.353974
O	23.983391	6.045396	9.406209
Al	19.999210	5.143345	5.433240
Si	11.371778	12.963367	0.398893
Si	5.785927	6.892842	2.928898
Si	14.430773	4.729161	12.004494
Si	9.808538	7.441759	11.935325
Si	16.022346	13.898496	2.917291
Si	7.403272	2.454289	5.433263
Si	18.515087	5.976936	0.367084
Si	16.949272	1.533624	2.885660
Si	14.466828	10.084718	11.979769
Si	8.908618	3.359277	0.373435
Si	11.355498	14.837913	5.408511
Si	20.027969	5.049729	8.514615
Si	17.545383	16.522665	13.518990
Si	23.162176	9.764431	1.907718
Si	25.569923	18.309456	10.992004
Si	28.737717	14.783626	8.482607
Si	20.038509	6.939454	13.499467
Si	23.113005	15.120935	1.844650
Si	14.460840	12.951070	10.962042
Si	16.128752	17.374701	8.462495
Si	27.162458	13.880486	13.469868
Si	18.485802	12.448910	1.872178
Si	24.666094	6.026603	10.914242
Si	23.104656	6.909898	13.486837
Si	14.472715	14.739419	8.465415
Si	28.708725	12.956691	10.936874
Si	20.055054	15.142504	1.892789
Si	24.675697	12.427040	1.945602
Si	18.446177	5.931084	11.026164
Si	27.071325	17.377604	8.436932
Si	16.001595	13.876472	13.512528
Si	17.540239	18.319443	10.970496
Si	20.018005	9.788214	1.826324
Si	25.556709	16.491058	13.515945
Si	23.076582	4.980606	8.512464
Si	14.465941	14.818043	5.411512
Si	16.946472	3.345492	0.364419
Si	11.353816	10.085061	11.943669
Si	8.909681	1.545742	2.910154
Si	5.742412	5.076463	5.402213
Si	14.449201	12.940931	0.403314
Si	11.364324	4.748976	12.036187
Si	20.000929	6.923748	2.909195
Si	18.355858	2.412869	5.464074
Si	7.320828	5.985553	0.402444
Si	15.987426	7.417347	12.006628

Si	9.804359	13.865637	2.949947
Rh	20.839245	7.905108	7.346006
Rh	23.720528	7.778046	7.849566
Rh	22.552584	8.836045	5.703597
C	20.938967	9.997118	7.595477
C	21.946722	10.555561	6.646924

π -C₂H₄/HRh₃

154

generated by VMD

H	21.059027	7.663212	9.946910
H	21.581894	10.654906	9.180388
H	22.523138	8.664816	10.442466
H	20.126802	9.642351	8.679508
H	23.227461	9.530056	6.478116
O	10.546951	11.755478	-0.018575
O	19.954601	5.771265	7.099393
O	23.377815	8.548017	3.113611
O	24.173935	18.906288	11.148862
O	8.684149	7.072137	11.120485
O	17.341774	12.785980	3.040830
O	16.758678	17.304935	7.096018
O	17.964840	7.444812	0.020026
O	24.161848	15.984115	2.921066
O	14.836285	11.396787	11.168041
O	10.551171	3.124974	0.066743
O	11.147306	14.283908	7.087177
O	15.520488	3.082989	0.056103
O	14.880593	14.317075	7.082075
O	11.178404	11.370817	11.118401
O	19.217379	16.036102	2.974773
O	8.682774	12.793324	3.032919
O	17.326050	7.066196	11.103602
O	26.567886	17.303852	7.085971
O	16.788332	12.396994	13.982362
O	19.190662	18.898952	11.149998
O	20.003271	8.558873	2.970095
O	24.147381	16.757280	14.116968
O	23.458122	5.670694	7.061601
O	19.953163	19.282091	13.679271
O	21.780714	4.462774	5.321094
O	21.722580	6.547634	2.569143
O	23.401255	19.287832	13.678685
O	26.728981	7.545092	13.662856
O	16.663204	15.331274	2.620433
O	14.927075	16.386208	5.384024
O	28.425898	10.540479	13.662122
O	26.734644	15.319384	2.593725
O	14.922775	10.500826	13.684488
O	16.654039	7.555130	13.640600
O	28.401840	16.347507	5.399749
O	19.714754	3.567564	8.580736
O	7.981225	12.306613	0.495634
O	6.341815	9.241220	0.537619
O	18.065248	4.534852	11.550442
O	13.007974	15.269426	8.734237
O	11.313304	0.592137	0.450393
O	14.703446	0.545466	0.414318
O	12.984676	13.290671	11.538538
O	6.308392	3.535735	8.658552

O	19.770557	9.381231	0.442386
O	18.046047	12.330402	0.496373
O	7.950727	4.531312	11.509595
O	11.094011	13.388701	2.026906
O	18.943264	3.841499	5.157542
O	6.954463	6.305445	1.970987
O	14.927814	6.343817	12.052505
O	11.088382	6.337070	12.048281
O	14.948527	13.411231	2.025023
O	7.033373	3.919876	5.264987
O	19.173241	6.173856	2.028068
O	17.277758	2.754883	2.048353
O	13.004992	9.663263	12.074950
O	8.757593	2.766176	2.026797
O	13.008588	14.570419	5.182597
O	21.695297	5.239944	9.073762
O	17.444342	17.117212	12.129623
O	21.722683	10.309207	1.966623
O	25.904112	17.110811	12.126518
O	27.851889	16.029842	9.044310
O	19.734983	6.509835	12.130000
O	23.605288	13.508332	2.082013
O	15.502126	13.815258	12.115856
O	15.522573	15.998487	9.070748
O	27.776253	13.737263	12.111430
O	19.731379	13.561311	2.102073
O	23.610836	6.496078	12.100875
O	13.022689	12.459274	0.475621
O	19.905848	6.508365	4.566915
O	6.255345	6.307231	4.513153
O	13.010533	4.561420	11.648693
O	10.509127	8.887135	11.633472
O	15.498068	13.899381	4.567360
O	8.721721	2.009052	4.569093
O	17.362860	4.925540	0.531806
O	17.246164	1.891375	4.585511
O	15.501842	8.893478	11.623839
O	8.703547	4.935104	0.520077
O	10.530008	13.864359	4.564923
O	19.207663	5.993408	9.611416
O	17.367479	14.937065	13.629722
O	24.214844	10.968433	2.532721
O	26.018599	17.862486	9.594793
O	28.507248	13.514452	9.584197
O	21.686218	7.435491	13.657984
O	21.686983	15.286581	2.484051
O	14.815844	13.493363	9.581508
O	17.373018	17.827713	9.591633
O	25.980921	14.940163	13.644430
O	19.215000	11.010443	2.505024
O	24.184380	6.006158	9.562527
Al	20.142242	5.006641	5.494225
Si	11.487675	12.978613	0.509037
Si	5.903444	6.887407	3.051898
Si	14.546908	4.767195	12.132498
Si	9.914870	7.456465	12.119889
Si	16.110514	13.860650	3.066361
Si	7.509127	2.407169	5.575760
Si	18.568026	6.015224	0.528775
Si	17.028345	1.487499	3.038908
Si	14.562299	10.115342	12.136804

Si	9.002952	3.340014	0.529427
Si	11.440255	14.776760	5.559545
Si	20.143389	5.143192	8.586235
Si	17.666241	16.533014	13.624249
Si	23.256018	9.773217	2.008036
Si	25.709124	18.357885	11.104632
Si	28.794285	14.782025	8.606412
Si	20.148079	6.913411	13.644852
Si	23.210791	15.082075	1.969294
Si	14.531599	12.996664	11.100248
Si	16.152445	17.422831	8.600595
Si	27.199175	13.869602	13.620162
Si	18.574574	12.429467	2.036336
Si	24.777723	6.020507	11.074301
Si	23.215469	6.886659	13.627991
Si	14.557335	14.774227	8.611457
Si	28.783333	12.979436	11.088579
Si	20.148695	15.124411	2.001478
Si	24.797400	12.408760	2.036515
Si	18.578327	6.019443	11.103088
Si	27.209538	17.449265	8.568501
Si	16.167765	13.850467	13.593326
Si	17.657341	18.352093	11.097683
Si	20.167635	9.819501	1.958504
Si	25.684065	16.536760	13.626950
Si	23.238449	5.114100	8.577110
Si	14.570516	14.801072	5.554924
Si	17.058706	3.326979	0.545788
Si	11.446408	10.117751	12.125735
Si	9.000881	1.526997	3.049240
Si	5.906670	5.072754	5.536469
Si	14.556072	12.985695	0.509583
Si	11.474685	4.762708	12.134104
Si	20.197088	6.937045	3.031037
Si	18.468336	2.372799	5.551328
Si	7.509115	6.028113	0.473382
Si	16.102764	7.463040	12.106674
Si	9.928957	13.849926	3.059771
Rh	20.800825	7.689588	6.269973
Rh	22.400307	8.574877	7.748648
Rh	22.210403	9.252769	5.165787
C	21.679737	8.539907	9.754388
C	21.156710	9.652493	9.049709

$\pi\text{-C}_2\text{H}_4/\text{H}_3\text{Rh}_3$

156

generated by VMD

H	20.398834	8.200073	8.170901
H	22.982504	8.449701	5.622781
H	19.009373	10.267978	4.893854
H	19.373404	11.958159	7.505863
H	18.492167	10.341804	7.372021
H	19.884874	11.886906	5.035944
H	22.736156	9.732203	7.275881
O	10.592554	11.755754	-0.066931
O	19.916361	5.690253	7.111963
O	6.263999	8.536102	3.031630
O	15.514678	3.888970	11.118413
O	8.742990	7.071941	11.096481

O	17.376133	12.838471	3.010148
O	16.824650	17.255423	7.085513
O	18.088242	7.485263	0.050682
O	15.557055	0.960648	2.909811
O	14.855416	11.401319	11.070668
O	10.565043	3.171474	0.002464
O	11.208339	14.245956	7.057839
O	15.532826	3.166790	0.052046
O	14.900963	14.402575	7.070550
O	11.166657	11.403195	11.158299
O	10.585215	1.086578	2.978497
O	8.666427	12.897517	3.032920
O	17.351992	7.064835	11.094352
O	26.610188	17.427036	7.065486
O	16.757801	12.465654	14.071573
O	10.516238	3.945963	11.145884
O	19.858988	8.602502	2.956308
O	15.535341	11.772650	0.016970
O	6.091886	5.833990	7.050845
O	19.993011	19.289263	13.670579
O	21.824387	4.510293	5.341926
O	21.732460	6.709042	2.600219
O	23.423601	19.285389	13.649384
O	26.718676	7.561005	13.656778
O	16.703770	15.389030	2.607938
O	14.958123	16.450951	5.351648
O	28.501394	10.538090	13.697199
O	26.821684	15.390072	2.568733
O	14.958380	10.544977	13.593642
O	16.656090	7.589215	13.613933
O	28.431911	16.367125	5.440809
O	19.805958	3.510672	8.643834
O	8.050314	12.356826	0.490557
O	6.313012	9.375486	0.489834
O	18.062000	4.533316	11.587648
O	13.001842	15.288474	8.738539
O	11.349652	0.658711	0.455948
O	14.729289	0.624415	0.401647
O	13.016951	13.296800	11.500909
O	6.382113	3.611651	8.526866
O	19.882908	9.443608	0.422344
O	18.080280	12.423811	0.457071
O	7.927755	4.554650	11.481014
O	11.094005	13.376565	2.002491
O	19.018114	3.860905	5.066679
O	6.896668	6.171775	1.941738
O	14.947662	6.346829	12.028975
O	11.131224	6.373334	12.079991
O	14.977065	13.474483	2.015755
O	7.092112	3.984405	5.391005
O	19.222633	6.157015	2.077915
O	17.286003	2.805171	2.043447
O	13.027058	9.686755	12.021870
O	8.800043	2.818114	1.984541
O	13.049240	14.620040	5.148471
O	21.725203	5.273279	9.056641
O	17.463356	17.153940	12.114110
O	21.761528	10.266333	2.097881
O	25.893833	17.096233	12.110433
O	27.812557	15.989993	8.974023
O	19.764051	6.501239	12.118772

O	23.603649	13.541717	2.009078
O	15.531952	13.789172	12.104284
O	15.491400	16.079659	9.079316
O	27.823997	13.800317	12.107562
O	19.765835	13.630166	2.101408
O	23.655285	6.570700	12.091114
O	13.057689	12.468418	0.486269
O	19.974722	6.594550	4.625086
O	6.300606	6.320712	4.478407
O	13.025426	4.573684	11.623652
O	10.524163	8.917314	11.655115
O	15.549297	13.960771	4.558984
O	8.744893	2.102805	4.533432
O	17.417780	4.971077	0.524250
O	17.291321	1.917983	4.576046
O	15.513848	8.892776	11.561988
O	8.726340	4.978100	0.450365
O	10.573681	13.901917	4.533715
O	19.209574	5.936672	9.620402
O	17.372246	14.969627	13.600329
O	24.253799	11.022758	2.519515
O	26.060862	17.880211	9.591863
O	28.517414	13.506518	9.570831
O	21.706488	7.496025	13.623764
O	21.728529	15.351080	2.483945
O	14.858538	13.547908	9.559171
O	17.391184	17.871134	9.576176
O	26.060513	14.977755	13.695848
O	19.251360	11.077743	2.443238
O	24.197926	6.064855	9.547551
Al	20.177288	5.049969	5.464815
Si	11.517861	12.977445	0.491174
Si	5.951882	6.930747	3.018701
Si	14.564454	4.770403	12.106309
Si	9.943082	7.479657	12.128102
Si	16.148872	13.916871	3.049971
Si	7.554398	2.444681	5.580473
Si	18.646868	6.038000	0.562493
Si	17.078606	1.523515	3.023567
Si	14.587389	10.132132	12.060524
Si	9.022024	3.384511	0.479155
Si	11.480046	14.794863	5.544298
Si	20.162191	5.102441	8.608491
Si	17.697479	16.557697	13.605401
Si	23.314249	9.792731	2.033210
Si	25.721498	18.357397	11.101174
Si	28.801126	14.764248	8.580544
Si	20.175217	6.955930	13.618778
Si	23.243963	15.125004	1.945805
Si	14.563587	13.006938	11.062390
Si	16.191261	17.454170	8.570440
Si	27.290649	13.917629	13.636630
Si	18.611595	12.497652	1.998685
Si	24.803537	6.064299	11.064722
Si	23.241556	6.964037	13.614222
Si	14.561158	14.830165	8.605246
Si	28.803326	13.003249	11.086349
Si	20.188684	15.192193	2.004234
Si	24.815689	12.458739	2.014249
Si	18.592890	6.005373	11.113350
Si	27.241186	17.455626	8.559281

Si	16.151098	13.901408	13.600253
Si	17.663095	18.392633	11.089108
Si	20.199049	9.848472	1.972536
Si	25.722013	16.564606	13.634240
Si	23.264578	5.165732	8.561696
Si	14.605055	14.862370	5.533018
Si	17.077393	3.380876	0.540794
Si	11.473115	10.141583	12.142489
Si	9.036125	1.593030	3.023324
Si	5.943661	5.127139	5.524961
Si	14.588574	13.004495	0.510182
Si	11.499339	4.792359	12.132926
Si	20.193768	7.011212	3.076825
Si	18.516130	2.420042	5.529553
Si	7.503299	6.042905	0.448135
Si	16.116449	7.473171	12.076928
Si	9.955684	13.897804	3.034862
Rh	20.412540	7.789538	6.669322
Rh	22.828953	8.109333	7.103006
Rh	21.075214	10.088304	6.624138
C	19.483112	11.003587	5.548059
C	19.201721	11.043869	6.923902

π -C₂H₄/H₅Rh₃

158

generated by VMD

H	22.069929	7.235834	6.831242
H	23.664921	8.332644	6.283721
H	21.128099	8.701697	7.754656
H	20.846613	9.454856	5.723289
H	18.946960	10.076316	7.358268
H	18.322760	9.095177	5.124282
H	18.521795	8.471384	8.180648
H	17.882050	7.497484	5.963633
H	22.585215	9.922991	6.880183
O	19.197628	16.794378	14.092928
O	19.828638	5.880480	7.067523
O	23.382223	8.576444	3.186302
O	15.546780	3.939657	11.103381
O	8.670218	7.120958	11.077044
O	17.374567	12.769133	3.000339
O	8.025237	2.493281	7.054035
O	18.002357	7.482280	0.054941
O	15.505457	1.026020	2.893431
O	14.865824	11.420627	11.215173
O	10.597538	3.143659	0.105625
O	11.160797	14.366436	7.050585
O	15.564043	3.063437	-0.004027
O	14.875145	14.185458	7.052186
O	11.254678	11.349972	10.996272
O	19.238953	15.985258	2.972581
O	8.733661	12.772941	3.006978
O	17.349886	7.084379	11.089551
O	26.650297	17.312143	7.042117
O	16.825068	12.385618	13.944654
O	19.238060	18.843369	11.129619
O	19.932314	8.509802	2.807160
O	24.158047	16.746229	14.049672
O	6.405114	5.401720	7.009727

O	19.992748	19.310488	13.645873
O	21.768545	4.468657	5.483561
O	21.780840	6.607531	2.428456
O	23.425276	19.281973	13.638515
O	26.781229	7.568302	13.605529
O	16.673412	15.309910	2.602047
O	14.969841	16.303329	5.425164
O	28.408442	10.580750	13.552050
O	26.723106	15.317163	2.547589
O	14.939356	10.502638	13.728888
O	16.715292	7.548746	13.644814
O	28.466272	16.395117	5.313981
O	19.740444	3.649243	8.547481
O	7.961780	12.272751	0.493249
O	6.419468	9.219366	0.600961
O	18.116159	4.556071	11.501014
O	13.068586	15.261145	8.700784
O	11.339488	0.597531	0.442582
O	14.729770	0.535608	0.395324
O	12.988139	13.310482	11.499242
O	6.295700	3.492493	8.858352
O	19.816357	9.452984	0.317988
O	18.050604	12.331660	0.447625
O	8.007858	4.555582	11.402918
O	11.127584	13.422939	1.998386
O	18.972599	3.900553	5.128274
O	7.034780	6.379240	1.995710
O	14.957413	6.370355	12.060012
O	11.072124	6.315836	11.957197
O	14.978539	13.381884	1.976891
O	6.964558	3.814348	4.972086
O	19.239004	6.073006	1.961296
O	17.321997	2.768641	1.990698
O	13.040666	9.664547	12.074563
O	8.794314	2.744582	2.045757
O	13.027024	14.545480	5.143120
O	21.735891	5.333333	8.878447
O	17.421713	17.143187	12.123492
O	21.735296	10.278687	1.942972
O	25.925354	17.138315	12.072528
O	27.940763	16.101324	9.035171
O	19.745596	6.549570	12.143704
O	23.657484	13.537391	2.103956
O	15.481588	13.851275	12.149193
O	15.609205	15.943549	8.935822
O	27.754719	13.658613	12.047909
O	19.766315	13.534375	2.049702
O	23.620026	6.455494	12.068120
O	13.035641	12.462006	0.434148
O	20.059908	6.510791	4.469936
O	6.181461	6.275262	4.498817
O	13.044232	4.587991	11.607283
O	10.560912	8.877723	11.548454
O	15.510911	13.839098	4.526705
O	8.757652	1.928084	4.585309
O	17.369005	4.939439	0.457391
O	17.302483	1.929181	4.538144
O	15.551125	8.921067	11.659155
O	8.721759	4.930020	0.554868
O	10.538709	13.904749	4.536429
O	19.284336	6.071052	9.616310

O	17.402349	14.938489	13.605824
O	24.202980	10.990394	2.575346
O	26.053961	17.895176	9.542004
O	28.525370	13.549330	9.531040
O	21.721342	7.434459	13.650214
O	21.712915	15.277171	2.470538
O	14.867805	13.489550	9.593352
O	17.425032	17.771896	9.558470
O	26.001339	14.945647	13.560808
O	19.226311	10.988222	2.441569
O	24.169947	6.059675	9.507693
Al	20.147488	5.093862	5.494185
Si	11.507576	13.004990	0.478327
Si	5.918386	6.913346	3.040438
Si	14.579217	4.790257	12.101502
Si	9.934501	7.467515	12.053459
Si	16.131519	13.828962	3.027726
Si	7.503202	2.386046	5.513704
Si	18.588642	6.016943	0.476536
Si	17.055346	1.517017	2.998454
Si	14.592599	10.129889	12.171826
Si	9.040565	3.338378	0.554475
Si	11.467163	14.819030	5.513586
Si	20.145254	5.233297	8.518618
Si	17.665201	16.542673	13.609209
Si	23.272644	9.773519	2.042438
Si	25.746841	18.390745	11.053804
Si	28.838085	14.827980	8.574324
Si	20.177069	6.930357	13.655877
Si	23.241854	15.101315	1.960564
Si	14.547869	13.015649	11.112972
Si	16.164568	17.428907	8.588984
Si	27.222475	13.875927	13.562533
Si	18.597143	12.413217	1.982092
Si	24.790607	6.038889	11.019473
Si	23.243786	6.868979	13.596757
Si	14.602142	14.723516	8.567294
Si	28.802162	12.969531	11.019136
Si	20.178022	15.101084	1.982564
Si	24.816540	12.407127	2.043626
Si	18.619493	6.054521	11.089855
Si	27.267262	17.499380	8.530785
Si	16.200186	13.850933	13.603477
Si	17.691347	18.337030	11.055270
Si	20.177027	9.803095	1.869924
Si	25.699757	16.541170	13.563622
Si	23.297419	5.057441	8.535754
Si	14.590468	14.722303	5.536144
Si	17.095861	3.335029	0.486930
Si	11.480584	10.120433	12.045018
Si	9.027555	1.486344	3.048293
Si	5.940289	4.982571	5.483574
Si	14.575302	12.973816	0.459585
Si	11.502399	4.757342	12.088203
Si	20.242792	6.912436	2.931797
Si	18.529924	2.417987	5.499749
Si	7.543885	6.041414	0.492111
Si	16.144001	7.478760	12.115979
Si	9.950193	13.865021	3.027863
Rh	20.488880	8.020077	6.396196
Rh	22.874350	8.276227	7.786592

Rh	22.648426	9.348008	5.373302
C	18.749275	9.007416	7.253550
C	18.389944	8.464074	6.013531

π -C₂H₄/H₇Rh₃

160

generated by VMD

H	22.552549	10.526716	5.047970
H	23.776133	9.565057	8.534993
H	21.979296	7.323220	6.550385
H	24.158125	8.215645	7.796669
H	20.751434	8.527876	7.780285
H	21.007666	9.235853	5.551292
H	18.836901	10.015118	7.196464
H	18.352848	9.050143	4.932204
H	18.291197	8.427648	7.987412
H	17.795826	7.468149	5.740121
H	23.019371	9.898514	6.799436
O	19.201696	16.775908	14.088020
O	19.737738	5.770506	7.056239
O	23.368631	8.573623	3.159334
O	15.534131	3.922645	11.098237
O	8.677066	7.103857	11.104834
O	17.350424	12.773458	2.991621
O	8.004088	2.476619	7.052392
O	17.995522	7.481862	0.050377
O	15.505458	1.003851	2.909741
O	14.854227	11.424328	11.183389
O	10.575198	3.135081	0.077922
O	11.163600	14.304396	7.044742
O	15.553202	3.078577	0.018972
O	14.888811	14.255664	7.050072
O	11.225061	11.360892	11.033283
O	19.238049	16.016472	2.971495
O	8.724707	12.785169	2.992069
O	17.356392	7.101878	11.095671
O	26.680908	17.425566	7.035199
O	16.821680	12.397922	13.940968
O	19.215256	18.882141	11.106497
O	19.954987	8.531425	2.832910
O	24.165672	16.768147	14.067261
O	6.387815	5.510066	7.008367
O	19.983007	19.292709	13.628942
O	21.789019	4.504183	5.457978
O	21.760227	6.584276	2.447989
O	23.413069	19.293314	13.630086
O	26.771467	7.562048	13.635010
O	16.681868	15.324704	2.593126
O	14.943529	16.350805	5.381438
O	28.420687	10.580985	13.590883
O	26.734289	15.325954	2.553720
O	14.939131	10.514208	13.698132
O	16.678875	7.560262	13.638897
O	28.456671	16.365366	5.351884
O	19.800272	3.616496	8.639727
O	7.975993	12.322265	0.464596
O	6.381566	9.195085	0.589458
O	18.093588	4.566804	11.511033

O	13.038713	15.263682	8.694112
O	11.332717	0.597737	0.444564
O	14.723941	0.549653	0.405182
O	12.980831	13.311559	11.496798
O	6.231644	3.528258	8.778568
O	19.799381	9.452584	0.341625
O	18.064869	12.336644	0.446676
O	7.986903	4.554657	11.480812
O	11.122564	13.420373	1.984071
O	19.020824	3.861346	5.007602
O	7.019428	6.359214	1.971096
O	14.954304	6.365079	12.029937
O	11.087510	6.333156	11.987798
O	14.960645	13.417276	1.978493
O	6.987928	3.875210	5.001234
O	19.212019	6.103986	1.989406
O	17.302729	2.771739	2.016289
O	13.029208	9.675049	12.069402
O	8.783841	2.761897	2.032659
O	13.029490	14.545176	5.142762
O	21.721388	5.429584	8.844517
O	17.448933	17.128571	12.097183
O	21.728447	10.309801	1.926994
O	25.924486	17.139212	12.076358
O	27.894571	16.069353	8.987918
O	19.757278	6.533408	12.133800
O	23.640062	13.531294	2.088424
O	15.475417	13.848772	12.137427
O	15.561487	15.991971	8.972657
O	27.755297	13.687986	12.059992
O	19.749811	13.551337	2.072640
O	23.609491	6.479259	12.082865
O	13.036565	12.461542	0.430562
O	20.036850	6.529703	4.496445
O	6.195208	6.338737	4.499467
O	13.033972	4.586136	11.593556
O	10.542432	8.887225	11.587480
O	15.517788	13.876243	4.528909
O	8.742867	1.961843	4.573372
O	17.370106	4.940324	0.480831
O	17.295376	1.906687	4.559231
O	15.533395	8.921001	11.633090
O	8.721464	4.936504	0.528729
O	10.545781	13.885629	4.524206
O	19.258059	6.065138	9.606397
O	17.368797	14.954367	13.618355
O	24.227346	10.987712	2.518444
O	26.063848	17.901983	9.545544
O	28.509771	13.539721	9.538912
O	21.709553	7.444080	13.664895
O	21.706156	15.282825	2.476885
O	14.854533	13.512367	9.581407
O	17.363651	17.843805	9.554310
O	25.989910	14.951956	13.575958
O	19.215740	11.001093	2.458903
O	24.187346	6.022605	9.542482
Al	20.148090	5.062892	5.473967
Si	11.504925	12.994754	0.467314
Si	5.911242	6.901867	3.006973
Si	14.569053	4.786837	12.087197
Si	9.930402	7.467232	12.082687

Si	16.123602	13.851940	3.024537
Si	7.491096	2.418242	5.506938
Si	18.582424	6.023109	0.493486
Si	17.050116	1.509066	3.013294
Si	14.582364	10.135804	12.144093
Si	9.024580	3.341066	0.535327
Si	11.465518	14.788713	5.516881
Si	20.133410	5.215845	8.526980
Si	17.666872	16.551958	13.596001
Si	23.258654	9.793308	2.024711
Si	25.740702	18.390295	11.055816
Si	28.816717	14.803198	8.562013
Si	20.171291	6.925108	13.649263
Si	23.233837	15.099883	1.964236
Si	14.537745	13.022074	11.096906
Si	16.115839	17.468092	8.581409
Si	27.211994	13.883727	13.572873
Si	18.587513	12.425317	1.989204
Si	24.785572	6.035887	11.051634
Si	23.235332	6.885980	13.610608
Si	14.583899	14.759317	8.570540
Si	28.788300	12.976720	11.031988
Si	20.170528	15.114997	1.989543
Si	24.818516	12.421937	2.015093
Si	18.613251	6.056541	11.088669
Si	27.283165	17.511517	8.538841
Si	16.179245	13.856517	13.597962
Si	17.670734	18.360832	11.060285
Si	20.173552	9.824143	1.883859
Si	25.701218	16.550356	13.571044
Si	23.284157	5.120485	8.525645
Si	14.588927	14.763925	5.527420
Si	17.087082	3.336724	0.510029
Si	11.467659	10.127552	12.071721
Si	9.023723	1.509886	3.042019
Si	5.951674	5.039687	5.498051
Si	14.569683	12.991584	0.461679
Si	11.494047	4.765521	12.080094
Si	20.229080	6.930815	2.950080
Si	18.542366	2.417856	5.483330
Si	7.542927	6.043252	0.462512
Si	16.130011	7.482955	12.101685
Si	9.951033	13.864516	3.017912
Rh	20.434885	7.886423	6.348659
Rh	22.678028	8.675016	7.852574
Rh	22.748713	9.027234	5.306595
C	18.568050	8.964438	7.075716
C	18.289957	8.437889	5.833932

C₂H₅/HRh₃

154

generated by VMD

H	23.538357	9.648004	9.990417
H	22.642277	11.161905	10.136069
H	23.792778	10.946429	8.791466
H	21.460190	10.648771	7.876178
H	21.066065	9.471852	9.163952
O	19.181473	16.824142	14.094447
O	19.906485	5.868655	7.073784

O	23.360098	8.645631	3.193350
O	15.479435	3.987167	11.126710
O	8.656968	7.142691	11.097538
O	17.316429	12.857735	3.016414
O	16.766893	17.340757	7.101212
O	17.966204	7.549918	0.055468
O	15.476736	1.055636	2.894346
O	14.823133	11.497160	11.194583
O	10.519153	3.216255	0.061189
O	28.458651	14.380845	7.067124
O	15.489424	3.168387	0.038179
O	14.856264	14.375159	7.083525
O	11.142149	11.435369	11.049999
O	10.526893	1.101298	2.972552
O	8.648267	12.888761	3.040575
O	17.290419	7.144790	11.090858
O	26.559294	17.393377	7.057963
O	16.754452	12.458200	13.917379
O	10.486165	3.951577	11.154058
O	19.881508	8.603518	2.862088
O	24.126274	16.840412	14.108071
O	6.118455	5.795290	7.057280
O	19.933935	19.358471	13.673875
O	21.760056	4.554241	5.342391
O	21.707272	6.661959	2.555510
O	23.374119	19.365747	13.661038
O	26.698351	7.634795	13.633961
O	16.640989	15.408139	2.627801
O	14.920668	16.443243	5.390675
O	28.380337	10.631886	13.599051
O	26.718307	15.404307	2.564092
O	14.876999	10.560019	13.692885
O	16.625576	7.637188	13.630087
O	28.398815	16.438602	5.373877
O	19.682676	3.673335	8.570238
O	7.962108	12.363657	0.508864
O	6.352536	9.288616	0.604624
O	18.047205	4.617717	11.518399
O	12.982059	15.344357	8.725572
O	11.284424	0.683207	0.445464
O	14.669076	0.631435	0.393966
O	12.928111	13.359985	11.517240
O	6.287652	3.603127	8.602552
O	19.771421	9.520089	0.367335
O	18.023197	12.425758	0.468093
O	7.914319	4.608713	11.514450
O	11.058505	13.450120	2.013713
O	18.934904	3.926665	5.124773
O	6.933842	6.455545	1.943712
O	14.890313	6.432255	12.046593
O	11.058322	6.408895	12.036449
O	14.922636	13.500644	2.012625
O	7.010333	3.979341	5.327137
O	19.186062	6.168696	1.989596
O	17.259693	2.843508	2.019073
O	12.975733	9.751394	12.039192
O	8.729665	2.839300	2.018711
O	12.993512	14.641421	5.174267
O	21.673153	5.331268	9.037241
O	17.401150	17.193869	12.134166
O	21.692661	10.353479	1.980885

O	25.868160	17.199802	12.101843
O	27.834049	16.130594	9.026305
O	19.697300	6.599202	12.125693
O	23.580021	13.596932	2.061394
O	15.412807	13.938747	12.146219
O	15.491349	16.071915	9.069920
O	27.713083	13.779928	12.078372
O	19.705835	13.645655	2.089391
O	23.576561	6.584589	12.084316
O	13.000445	12.535116	0.468865
O	19.866745	6.586326	4.521477
O	6.282601	6.322948	4.468170
O	12.981742	4.638659	11.633601
O	10.487902	8.952798	11.588318
O	15.479785	13.957885	4.563141
O	8.704156	2.096170	4.563846
O	17.325533	5.017286	0.489010
O	17.240221	1.973627	4.557800
O	15.476110	8.980618	11.616155
O	8.661318	5.014947	0.527636
O	10.512202	13.957732	4.546350
O	19.191847	6.102487	9.598259
O	17.340523	15.005763	13.623056
O	24.174351	11.064898	2.564664
O	25.984915	17.948847	9.566330
O	28.460052	13.603950	9.555270
O	21.652342	7.525983	13.645919
O	21.664888	15.372585	2.473193
O	14.790504	13.576113	9.593143
O	17.333094	17.910608	9.596883
O	25.956640	15.028367	13.618984
O	19.190689	11.090693	2.468735
O	24.154886	6.069686	9.555135
Al	20.115396	5.107988	5.473818
Si	11.464071	13.049696	0.497318
Si	5.882011	6.979423	3.052436
Si	14.518513	4.852378	12.117186
Si	9.889439	7.532507	12.095177
Si	16.087986	13.933010	3.058195
Si	7.499665	2.463856	5.588809
Si	18.547649	6.090891	0.501022
Si	17.014305	1.575713	3.010854
Si	14.532763	10.197859	12.134455
Si	8.969342	3.421688	0.523642
Si	11.425064	14.866572	5.540726
Si	20.110128	5.251660	8.561090
Si	17.640232	16.601442	13.623606
Si	23.230917	9.851437	2.053325
Si	25.682137	18.447069	11.077602
Si	28.763676	14.874536	8.587787
Si	20.113806	7.003055	13.637637
Si	23.186623	15.170672	1.951088
Si	14.487074	13.089497	11.111840
Si	16.134663	17.484629	8.591564
Si	27.179718	13.961278	13.598251
Si	18.551491	12.510684	2.010013
Si	24.747377	6.096533	11.071412
Si	23.180183	6.975722	13.612465
Si	14.529300	14.844178	8.609393
Si	28.732618	13.047242	11.051461
Si	20.125025	15.208412	1.993492

Si	24.767433	12.492912	2.043115
Si	18.553228	6.110043	11.084699
Si	27.186108	17.547031	8.546097
Si	16.131340	13.927963	13.600409
Si	17.621197	18.428085	11.104682
Si	20.130402	9.891591	1.914947
Si	25.659830	16.625292	13.604330
Si	23.216698	5.176026	8.562035
Si	14.555111	14.859446	5.553714
Si	17.029686	3.417569	0.518354
Si	11.413397	10.195198	12.072709
Si	8.979583	1.605746	3.045637
Si	5.891819	5.147609	5.535408
Si	14.532917	13.067417	0.498032
Si	11.448357	4.836607	12.127450
Si	20.159204	7.005507	2.987265
Si	18.461590	2.460951	5.523816
Si	7.472568	6.112677	0.455608
Si	16.071796	7.546270	12.096106
Si	9.903326	13.935927	3.045329
Rh	20.821732	7.753823	6.201723
Rh	22.654106	8.255182	7.637694
Rh	22.629488	9.125781	5.384894
C	21.884256	9.895778	8.550504
C	23.034620	10.434535	9.400636

C₂H₅/H₂Rh₃

156

generated by VMD

H	21.652018	7.864967	7.973865
H	22.621349	10.032414	6.867630
H	20.436129	10.613396	5.613112
H	18.741266	10.751713	6.144022
H	19.170301	9.606611	4.852108
H	20.028402	9.427857	7.823510
H	18.850138	8.331920	7.006144
O	19.181782	16.826157	14.107347
O	19.954079	5.833756	7.094682
O	23.377174	8.620232	3.226346
O	15.502133	3.969464	11.151009
O	8.670833	7.158947	11.081683
O	17.356987	12.833622	3.042955
O	16.744711	17.469099	7.092962
O	18.019258	7.537658	0.119690
O	15.482034	1.050248	2.911326
O	14.830538	11.475923	11.224901
O	10.558220	3.180757	0.100574
O	28.487152	14.384544	7.074159
O	15.508199	3.150322	0.030164
O	14.828442	14.275737	7.092251
O	11.190017	11.402560	11.067607
O	19.209368	16.052412	2.961226
O	8.672619	12.861970	3.063170
O	17.303194	7.117004	11.099000
O	26.585365	17.382973	7.068982
O	16.798748	12.437624	13.949376
O	19.188314	18.926786	11.173253
O	19.904013	8.569866	2.812250
O	24.120558	16.795918	14.083726
O	6.165406	5.556975	7.021456

O	19.954184	19.354000	13.692379
O	21.741598	4.485209	5.301759
O	21.742382	6.655621	2.504840
O	23.389849	19.336750	13.684458
O	26.708857	7.610207	13.635073
O	16.638529	15.366295	2.630376
O	14.958274	16.374023	5.444928
O	28.409506	10.619006	13.632169
O	26.714331	15.384127	2.565925
O	14.920646	10.542955	13.728106
O	16.668615	7.610513	13.649910
O	28.422453	16.452751	5.378131
O	19.707024	3.637440	8.600577
O	7.958533	12.324614	0.540722
O	6.401568	9.257421	0.648933
O	18.070644	4.592704	11.532391
O	13.006281	15.324250	8.747741
O	11.306056	0.638406	0.432030
O	14.714105	0.605181	0.400359
O	12.941859	13.350870	11.537762
O	6.332654	3.586795	8.797626
O	19.810663	9.529860	0.333556
O	18.005829	12.395392	0.483193
O	7.943100	4.609992	11.399201
O	11.075368	13.443335	2.032231
O	18.917265	3.950281	5.133638
O	6.993045	6.430129	1.984217
O	14.914897	6.412999	12.082661
O	11.056626	6.381193	12.028303
O	14.954155	13.426120	2.020494
O	6.998660	3.889125	5.114082
O	19.208370	6.111644	2.049801
O	17.269398	2.825434	2.022274
O	13.006671	9.720584	12.094170
O	8.751435	2.799357	2.046777
O	13.001469	14.629319	5.162748
O	21.697006	5.299665	9.051634
O	17.381418	17.216927	12.166475
O	21.720186	10.331875	1.979313
O	25.891228	17.169312	12.108118
O	27.844559	16.101460	9.045021
O	19.708200	6.592362	12.131068
O	23.604609	13.581040	2.094054
O	15.426540	13.907173	12.185884
O	15.541297	16.025728	8.995377
O	27.708841	13.726635	12.079521
O	19.740633	13.595265	2.064908
O	23.611275	6.548039	12.079173
O	13.006020	12.511537	0.481239
O	20.017164	6.635339	4.567506
O	6.216366	6.306337	4.499267
O	13.004100	4.628071	11.653740
O	10.519092	8.937533	11.614899
O	15.486917	13.901898	4.568995
O	8.745946	1.995368	4.590406
O	17.353348	4.997691	0.503520
O	17.260771	1.966006	4.564735
O	15.506128	8.962527	11.650759
O	8.703605	4.984552	0.559462
O	10.513382	13.969895	4.562449
O	19.210554	6.071264	9.607193

O	17.363901	14.993320	13.622155
O	24.187031	11.044024	2.612558
O	25.997162	17.926519	9.578204
O	28.487074	13.574366	9.561492
O	21.681814	7.481552	13.645212
O	21.682621	15.347258	2.461861
O	14.816734	13.561893	9.627501
O	17.411957	17.809361	9.598817
O	25.971762	14.992167	13.625171
O	19.206709	11.052580	2.459034
O	24.146172	6.150554	9.504246
Al	20.123501	5.112576	5.482770
Si	11.474688	13.041851	0.513540
Si	5.902287	6.950366	3.053964
Si	14.540489	4.832977	12.142557
Si	9.901289	7.517504	12.096211
Si	16.106201	13.884765	3.067909
Si	7.517888	2.424083	5.562708
Si	18.581957	6.064641	0.547502
Si	17.022926	1.563650	3.020584
Si	14.561448	10.177280	12.172572
Si	9.005989	3.388482	0.554399
Si	11.439667	14.876121	5.546648
Si	20.135998	5.214670	8.578550
Si	17.641592	16.594488	13.639170
Si	23.254900	9.830347	2.083102
Si	25.702812	18.423698	11.092169
Si	28.786430	14.855488	8.602705
Si	20.139748	6.971504	13.643844
Si	23.211311	15.152832	1.959572
Si	14.501726	13.070642	11.141911
Si	16.165422	17.474688	8.612448
Si	27.204777	13.935454	13.605526
Si	18.568865	12.476628	2.011530
Si	24.763668	6.109276	11.021115
Si	23.213545	6.942600	13.606928
Si	14.546108	14.801997	8.610197
Si	28.753654	13.018001	11.060310
Si	20.148125	15.161336	1.977911
Si	24.782265	12.468124	2.078246
Si	18.570553	6.086340	11.092024
Si	27.203146	17.521683	8.563228
Si	16.165548	13.903637	13.628506
Si	17.650011	18.401497	11.089085
Si	20.159838	9.871854	1.889536
Si	25.663565	16.587263	13.604972
Si	23.236786	5.141958	8.572708
Si	14.563141	14.796124	5.567358
Si	17.045311	3.398629	0.520968
Si	11.446656	10.173771	12.108060
Si	8.997586	1.546233	3.053077
Si	5.894421	5.027310	5.483828
Si	14.544989	13.024799	0.502384
Si	11.466908	4.815449	12.140030
Si	20.206337	6.984487	3.000322
Si	18.477037	2.470125	5.530877
Si	7.521724	6.088862	0.486867
Si	16.100355	7.523573	12.120799
Si	9.913879	13.925589	3.059691
Rh	21.201302	7.656181	6.344429
Rh	23.159021	8.602540	7.731580

Rh	22.901514	9.155400	5.410723
C	19.727201	8.986051	6.862728
C	19.514029	10.036560	5.799631

C₂H₅/H₄Rh₃

158

generated by VMD

H	23.777405	8.754636	7.002513
H	25.071131	10.834856	6.611601
H	21.097300	8.459464	7.580421
H	21.259510	9.046122	5.483523
H	24.836262	12.014462	5.283591
H	22.561852	11.196731	4.819352
H	7.773421	10.336493	4.894183
H	22.629404	11.053464	6.617059
H	22.469421	9.152224	8.602738
O	19.112619	16.712355	14.019155
O	19.894756	5.750190	7.013802
O	23.426256	8.515282	3.008522
O	15.409669	3.868223	11.037755
O	8.606592	7.019916	11.009808
O	17.256525	12.784984	2.932734
O	16.666464	17.320499	6.994393
O	17.953701	7.447735	-0.016218
O	15.413783	0.949217	2.823133
O	14.757448	11.362344	11.074249
O	19.111286	8.108574	14.080864
O	28.421579	14.272565	6.980817
O	24.076385	8.078738	14.083018
O	14.760009	14.268412	6.972531
O	11.083935	11.335024	10.994758
O	19.124535	16.015741	2.890741
O	25.910387	12.803237	2.942879
O	17.227575	7.022282	11.019900
O	26.476543	17.282532	6.982833
O	16.645525	12.385284	13.942079
O	19.093174	18.873075	11.061783
O	19.752838	8.503841	2.772786
O	24.058014	16.714323	14.041295
O	6.026718	5.583381	6.997502
O	19.866167	19.243671	13.587510
O	21.675417	4.446521	5.202536
O	21.634441	6.618298	2.474063
O	23.307299	19.239609	13.571830
O	26.623165	7.526471	13.550658
O	16.566599	15.327721	2.512049
O	14.832076	16.369844	5.310295
O	28.341167	10.504845	13.539160
O	26.657078	15.318274	2.478507
O	14.812828	10.466460	13.589083
O	16.554802	7.518130	13.555882
O	28.320187	16.346209	5.300184
O	19.622498	3.537770	8.485183
O	7.905287	12.315192	0.396739
O	6.196242	9.246202	0.438132
O	17.972902	4.494071	11.457650
O	12.929289	15.249258	8.652618
O	11.224677	0.589428	0.363694
O	14.608421	0.544236	0.321087

O	12.892145	13.247483	11.435099
O	6.208885	3.454447	8.617490
O	19.732058	9.448452	0.291130
O	17.952225	12.324037	0.388213
O	7.844913	4.481224	11.399971
O	10.989168	13.352904	1.933036
O	18.850637	3.845124	5.069104
O	6.844189	6.189878	1.902463
O	14.824590	6.312135	11.968099
O	11.001210	6.305673	11.966439
O	14.855549	13.398170	1.926429
O	6.930099	3.908146	5.147371
O	19.127268	6.044401	1.933869
O	17.181341	2.752597	1.935992
O	12.913916	9.628306	11.950723
O	8.685482	2.760448	1.929765
O	12.915490	14.561039	5.052732
O	21.596426	5.187889	9.015635
O	17.355766	17.075069	12.034224
O	21.623270	10.229476	1.973390
O	25.787598	17.075987	12.027361
O	27.762556	16.002726	8.939634
O	19.643131	6.468998	12.032484
O	23.500381	13.498928	1.972383
O	15.402638	13.782478	12.026830
O	15.471801	15.927483	8.947119
O	27.681786	13.694229	12.003901
O	19.647060	13.550722	1.995932
O	23.529612	6.467925	12.008603
O	12.930692	12.421875	0.394756
O	19.836161	6.518832	4.466470
O	6.152837	6.324775	4.452305
O	12.915293	4.527020	11.547590
O	10.419984	8.849677	11.513659
O	15.414731	13.895821	4.462152
O	8.621204	1.997857	4.467273
O	17.272558	4.920283	0.403596
O	17.171280	1.887998	4.473905
O	15.413192	8.856959	11.535301
O	8.608050	4.913607	0.398478
O	10.424861	13.865354	4.466776
O	19.101635	5.956981	9.515935
O	17.245113	14.914971	13.562775
O	24.126602	10.964159	2.416204
O	25.923864	17.827551	9.495410
O	28.422638	13.488484	9.475480
O	21.591370	7.423786	13.545568
O	21.597509	15.285229	2.397444
O	14.724722	13.449935	9.482885
O	17.298418	17.778278	9.495852
O	25.906672	14.913409	13.551733
O	19.122351	11.004458	2.396013
O	24.084921	5.963424	9.470951
Al	20.040342	5.026712	5.396945
Si	11.395339	12.940085	0.418543
Si	5.822195	6.873446	2.949766
Si	14.452307	4.732815	12.031137
Si	9.828182	7.425747	12.016782
Si	16.022598	13.852791	2.958930
Si	7.411830	2.395465	5.473663
Si	18.507542	5.980276	0.434820

Si	16.947174	1.484264	2.928682
Si	14.470073	10.079237	12.036260
Si	8.912423	3.319284	0.423020
Si	11.352358	14.773560	5.451745
Si	20.040077	5.117524	8.493262
Si	17.572376	16.504574	13.536083
Si	23.167133	9.750333	1.939416
Si	25.611647	18.324827	11.004560
Si	28.714272	14.761871	8.506560
Si	20.055119	6.896071	13.538822
Si	23.118069	15.076948	1.874563
Si	14.441588	12.959052	11.004534
Si	16.080090	17.365980	8.508357
Si	27.147947	13.865874	13.525913
Si	18.487129	12.420821	1.927250
Si	24.693077	5.982261	10.991215
Si	23.120655	6.880497	13.528529
Si	14.468056	14.725189	8.507845
Si	28.690937	12.944157	10.978766
Si	20.060184	15.114558	1.910817
Si	24.699278	12.407887	1.929862
Si	18.483414	5.981038	11.008949
Si	27.115868	17.422359	8.467684
Si	16.036608	13.834764	13.518614
Si	17.568575	18.309277	11.003874
Si	20.057531	9.797095	1.853740
Si	25.592693	16.506908	13.533736
Si	23.133158	5.016936	8.523097
Si	14.473243	14.779704	5.449578
Si	16.962038	3.323713	0.432665
Si	11.355634	10.083835	12.003402
Si	8.910784	1.515010	2.947976
Si	5.794848	5.044105	5.437465
Si	14.465309	12.948393	0.417000
Si	11.384825	4.730655	12.044762
Si	20.078842	6.920211	2.924668
Si	18.384378	2.371894	5.451289
Si	7.394967	5.985935	0.387035
Si	16.006748	7.424467	12.019594
Si	9.830652	13.845527	2.957913
Rh	20.878660	7.643625	6.186307
Rh	22.753109	7.809346	7.913473
Rh	23.100275	8.746354	5.423522
C	24.600309	10.992064	5.632048
C	23.101336	10.749683	5.672859

C₂H₅/H₆Rh₃

160

generated by VMD

H	22.816534	10.610844	5.226119
H	22.459826	7.969356	9.446535
H	21.474264	9.113358	5.400133
H	22.166143	9.785840	8.636679
H	21.263277	8.085877	8.040031
H	23.234388	9.805371	6.773194
H	19.043531	9.986341	4.931185
H	17.697657	10.005836	6.093446
H	18.107872	8.498130	5.239680
H	19.931341	9.939255	7.299945

H	18.948626	8.464532	7.643292
O	19.243179	16.795946	14.115879
O	19.998714	5.798950	7.117530
O	23.497602	8.598471	3.067269
O	15.539506	3.958899	11.140986
O	8.720810	7.121189	11.126457
O	17.379457	12.873147	3.039147
O	16.820082	17.378029	7.080869
O	18.066322	7.537707	0.071257
O	15.535853	1.028095	2.920688
O	14.869399	11.454454	11.137053
O	10.593121	3.213243	0.040081
O	11.221829	14.338030	7.065773
O	15.561752	3.157852	0.020758
O	14.891336	14.417714	7.068410
O	11.214703	11.424671	11.092786
O	10.583967	1.092612	2.990361
O	8.707431	12.887617	3.022908
O	17.355890	7.119957	11.097449
O	26.608213	17.429956	7.072361
O	16.784151	12.480497	14.048242
O	10.561989	3.936340	11.130073
O	19.939665	8.598056	2.856819
O	24.181581	16.816700	14.128250
O	6.118567	5.815745	7.084061
O	19.987047	19.325424	13.663233
O	21.819647	4.621635	5.294863
O	21.749195	6.646451	2.582237
O	23.432730	19.345015	13.671622
O	26.777824	7.615102	13.662615
O	16.702063	15.421150	2.607249
O	14.957792	16.501848	5.380679
O	28.466400	10.603087	13.640201
O	26.783705	15.411642	2.583741
O	14.945334	10.577912	13.663392
O	16.691689	7.614854	13.633021
O	28.432341	16.428583	5.408901
O	19.759422	3.611299	8.635271
O	8.034750	12.406681	0.474188
O	6.318695	9.329125	0.510981
O	18.102501	4.591512	11.543050
O	13.034512	15.352963	8.749357
O	11.345071	0.685350	0.461966
O	14.736015	0.629508	0.414140
O	13.018782	13.345879	11.521791
O	6.311693	3.587163	8.550035
O	19.835211	9.543968	0.378828
O	18.074421	12.400263	0.493274
O	8.009956	4.584344	11.585288
O	11.119865	13.455956	2.015177
O	19.001688	3.925220	5.114430
O	6.965055	6.266913	1.993397
O	14.954672	6.408841	12.054220
O	11.125398	6.390577	12.046917
O	14.987144	13.493176	2.023772
O	7.076935	4.046474	5.297961
O	19.229805	6.151826	2.033714
O	17.294151	2.839694	2.033810
O	13.040445	9.720814	12.050604
O	8.814400	2.850271	2.008290
O	13.049274	14.678378	5.140625

O	21.732306	5.282309	9.106605
O	17.507013	17.149088	12.108308
O	21.749199	10.359383	2.011822
O	25.927427	17.174831	12.125717
O	27.852795	16.071783	9.003655
O	19.764990	6.566244	12.131245
O	23.631750	13.579288	2.059032
O	15.542386	13.855381	12.110106
O	15.560574	16.075754	9.057485
O	27.803715	13.783641	12.092751
O	19.764194	13.641062	2.092500
O	23.637550	6.539367	12.090237
O	13.060020	12.519279	0.487331
O	19.938021	6.627331	4.570244
O	6.277433	6.485598	4.562397
O	13.047199	4.619709	11.637156
O	10.548411	8.939662	11.617323
O	15.546902	14.011885	4.563519
O	8.742947	2.129110	4.543716
O	17.395796	5.005558	0.498098
O	17.287064	1.982750	4.573039
O	15.541780	8.955672	11.618028
O	8.734448	5.005384	0.485890
O	10.569246	13.947673	4.550086
O	19.237867	6.058526	9.607689
O	17.373802	15.004685	13.649600
O	24.270260	11.040797	2.489840
O	26.040621	17.912361	9.591108
O	28.545193	13.571945	9.564844
O	21.722963	7.511978	13.645961
O	21.724018	15.362113	2.488401
O	14.851557	13.572364	9.568932
O	17.365175	17.940416	9.590207
O	26.015829	15.001979	13.632725
O	19.246815	11.089057	2.501704
O	24.282581	5.968667	9.571114
Al	20.157841	5.122005	5.490489
Si	11.522227	13.031030	0.504266
Si	5.935062	6.948555	3.030135
Si	14.580770	4.829294	12.126823
Si	9.955181	7.513378	12.118016
Si	16.151213	13.950887	3.058895
Si	7.547915	2.513379	5.571864
Si	18.623085	6.072539	0.527732
Si	17.065411	1.571342	3.028108
Si	14.595244	10.178209	12.114177
Si	9.046190	3.412377	0.505138
Si	11.482502	14.859394	5.542181
Si	20.180206	5.191651	8.605021
Si	17.706062	16.593792	13.618834
Si	23.284740	9.855262	2.001550
Si	25.741695	18.419203	11.099001
Si	28.828320	14.843470	8.590641
Si	20.186382	6.990444	13.635024
Si	23.245472	15.156945	1.964786
Si	14.566609	13.056438	11.082541
Si	16.181044	17.499086	8.574545
Si	27.257217	13.955350	13.609621
Si	18.608250	12.507859	2.030416
Si	24.826033	6.055751	11.098101
Si	23.249401	6.959631	13.611030

Si	14.582355	14.857707	8.606259
Si	28.816477	13.034417	11.069393
Si	20.184954	15.204278	2.006751
Si	24.835520	12.493517	2.012483
Si	18.614613	6.078981	11.098426
Si	27.237820	17.515892	8.565536
Si	16.170759	13.921953	13.602795
Si	17.694885	18.412317	11.105124
Si	20.190319	9.898716	1.929659
Si	25.715275	16.598846	13.625864
Si	23.261806	5.171249	8.587901
Si	14.603755	14.910478	5.539635
Si	17.093214	3.405440	0.525720
Si	11.481277	10.174922	12.104689
Si	9.041265	1.614909	3.037023
Si	5.946512	5.192461	5.557306
Si	14.592274	13.049958	0.512369
Si	11.511245	4.815709	12.121978
Si	20.201885	7.004223	3.021084
Si	18.509329	2.469646	5.537160
Si	7.524657	6.078368	0.473908
Si	16.136385	7.521389	12.099767
Si	9.961976	13.935070	3.046820
Rh	20.972679	7.783072	6.298498
Rh	22.801546	8.541146	8.010895
Rh	23.174793	9.122761	5.309959
C	19.451456	9.055052	6.857231
C	18.537741	9.395629	5.706676

CH₃CH/HRh₃

154

generated by VMD

H	20.836666	11.652808	6.200714
H	20.714079	10.532491	7.593348
H	19.322815	10.771063	6.481026
H	20.490183	9.706676	4.619223
H	22.639349	9.571717	8.019419
O	19.133097	16.789665	14.105147
O	19.995144	5.888707	7.074887
O	23.370964	8.610668	3.180940
O	15.446136	3.948803	11.114506
O	8.625463	7.086257	11.058192
O	17.301588	12.821470	3.003710
O	16.752607	17.304365	7.075727
O	17.969149	7.524340	0.073545
O	15.429290	1.054669	2.877971
O	14.783430	11.456205	11.188087
O	10.489449	3.190696	0.037470
O	28.422609	14.401415	7.045720
O	15.454089	3.133823	0.003426
O	14.805003	14.301495	7.059940
O	11.122050	11.380684	10.982407
O	19.150564	16.043552	2.960403
O	8.622852	12.840037	3.021771
O	17.250994	7.095601	11.065130
O	26.515051	17.292149	7.038310
O	16.698345	12.409565	13.897566
O	19.127514	18.920523	11.137600
O	19.778954	8.532864	2.730588
O	24.070995	16.785383	14.056108

O	6.053726	5.707354	7.050043
O	19.889366	19.321230	13.658282
O	21.707043	4.563385	5.253282
O	21.666836	6.646004	2.600154
O	23.340363	19.324753	13.650493
O	26.660589	7.600445	13.591267
O	16.588264	15.361714	2.609885
O	14.896494	16.382919	5.386348
O	28.339451	10.599309	13.538062
O	26.657576	15.368045	2.547317
O	14.828732	10.499899	13.677057
O	16.598955	7.597049	13.605773
O	28.371609	16.435738	5.317750
O	19.613195	3.657833	8.490678
O	7.907516	12.310327	0.496161
O	6.324290	9.260602	0.590880
O	18.017824	4.571760	11.493039
O	12.963560	15.318835	8.708967
O	11.249113	0.658051	0.429388
O	14.631476	0.600156	0.379690
O	12.879934	13.315735	11.499684
O	6.275753	3.528026	8.605406
O	19.753670	9.533806	0.271223
O	17.957760	12.379287	0.443226
O	7.878375	4.552425	11.468101
O	11.027274	13.435549	2.005863
O	18.880827	3.935327	5.198047
O	6.872509	6.406463	1.923906
O	14.854420	6.391786	12.035374
O	11.024288	6.365338	12.009423
O	14.902732	13.424655	1.988611
O	6.950892	3.919603	5.304917
O	19.187128	6.057861	1.954735
O	17.231058	2.813522	1.976479
O	12.938295	9.694986	12.003084
O	8.705703	2.783604	1.992527
O	12.952486	14.612226	5.144973
O	21.644003	5.222278	9.070744
O	17.370558	17.152267	12.128205
O	21.651821	10.274572	1.966383
O	25.834225	17.151636	12.069222
O	27.824705	16.119974	9.038053
O	19.655916	6.559535	12.108500
O	23.561262	13.581289	2.060278
O	15.365181	13.902590	12.130838
O	15.492092	15.994966	9.029549
O	27.646564	13.699757	12.028484
O	19.680046	13.592345	2.033399
O	23.549879	6.526358	12.063231
O	12.956869	12.499653	0.453880
O	19.757420	6.598423	4.504940
O	6.301209	6.293777	4.465700
O	12.949437	4.594101	11.624587
O	10.451464	8.904696	11.537240
O	15.436502	13.898337	4.538527
O	8.666788	2.055337	4.536306
O	17.291294	4.986044	0.441004
O	17.213413	1.984896	4.521080
O	15.443510	8.937876	11.593902
O	8.614405	4.972130	0.521618
O	10.463645	13.943692	4.535561

O	19.163893	6.061504	9.578894
O	17.307636	14.957922	13.604017
O	24.114742	11.041264	2.562812
O	25.941187	17.915840	9.537255
O	28.436674	13.574689	9.517528
O	21.619967	7.488965	13.613378
O	21.625731	15.330617	2.457947
O	14.744289	13.521399	9.577599
O	17.326563	17.833118	9.580749
O	25.912664	14.976590	13.579420
O	19.157833	11.041199	2.419284
O	24.113319	6.022642	9.523504
Al	20.067827	5.136179	5.452710
Si	11.421854	13.018654	0.490284
Si	5.852637	6.945580	3.055629
Si	14.485702	4.811828	12.106556
Si	9.854274	7.488380	12.055183
Si	16.055519	13.878456	3.037399
Si	7.467735	2.413379	5.569007
Si	18.529493	6.042645	0.471806
Si	16.974075	1.561198	2.983966
Si	14.492064	10.148151	12.114302
Si	8.938255	3.381940	0.502764
Si	11.387351	14.862535	5.512222
Si	20.093031	5.217134	8.549751
Si	17.599024	16.556246	13.617473
Si	23.199831	9.810312	2.041098
Si	25.646715	18.405855	11.053774
Si	28.740360	14.862236	8.572694
Si	20.079748	6.972846	13.614937
Si	23.151945	15.149737	1.939743
Si	14.440847	13.046062	11.100137
Si	16.128906	17.415869	8.572090
Si	27.147141	13.921243	13.553789
Si	18.515610	12.465066	1.973309
Si	24.713892	6.045235	11.041854
Si	23.146955	6.936713	13.585082
Si	14.499407	14.785891	8.586106
Si	28.692671	12.995452	11.008080
Si	20.089828	15.160161	1.968263
Si	24.728895	12.458743	2.034208
Si	18.519011	6.067650	11.063069
Si	27.142136	17.507593	8.518981
Si	16.091610	13.886275	13.581752
Si	17.596069	18.372810	11.084975
Si	20.086468	9.843692	1.837247
Si	25.610605	16.572554	13.568000
Si	23.175837	5.088411	8.562228
Si	14.516045	14.801351	5.532425
Si	16.995361	3.386218	0.476422
Si	11.377786	10.147751	12.018509
Si	8.939675	1.550547	3.021866
Si	5.849643	5.103853	5.499924
Si	14.495154	13.015416	0.472206
Si	11.414554	4.793899	12.111286
Si	20.093199	6.954745	2.970166
Si	18.425673	2.444216	5.512429
Si	7.419965	6.063329	0.439430
Si	16.038624	7.503540	12.074766
Si	9.861249	13.908188	3.032406
Rh	20.958578	7.706509	6.237866

Rh	23.017525	8.125580	7.585824
Rh	22.858553	9.111684	5.430733
C	20.892765	9.582450	5.643043
C	20.423603	10.685754	6.547487

CH₃CH/H₃Rh₃

156

generated by VMD

H	21.165209	8.263144	7.910847
H	23.279734	9.451721	6.953619
H	20.983358	11.741829	6.084908
H	21.137012	10.720585	7.549846
H	19.564760	10.873391	6.707637
H	20.474604	9.716845	4.694103
H	22.550880	9.367613	8.682304
O	19.134193	16.776766	14.086271
O	19.915859	5.806885	7.067462
O	23.325890	8.581216	3.129098
O	15.448758	3.925591	11.100865
O	8.627542	7.083252	11.064650
O	17.295549	12.806245	2.993407
O	16.739311	17.283550	7.052251
O	17.967737	7.503414	0.053840
O	15.429999	1.022629	2.886658
O	14.776786	11.436792	11.146056
O	10.499943	3.159782	0.030250
O	28.429459	14.344326	7.024212
O	15.462558	3.118214	-0.008572
O	14.810005	14.326352	7.040492
O	11.131262	11.365457	10.996553
O	19.153217	16.044636	2.934824
O	8.630044	12.820742	2.998818
O	17.262062	7.078142	11.049062
O	26.535440	17.347548	7.021785
O	16.723906	12.406134	13.880844
O	19.132881	18.916994	11.109196
O	19.854832	8.527730	2.734924
O	24.076250	16.772436	14.050920
O	6.081450	5.729488	7.031333
O	19.894205	19.302586	13.634077
O	21.727934	4.565637	5.265518
O	21.679873	6.577819	2.554287
O	23.341026	19.308760	13.634294
O	26.671721	7.575288	13.600759
O	16.596918	15.350861	2.582539
O	14.881130	16.397326	5.349183
O	28.358210	10.584425	13.554954
O	26.658518	15.352768	2.531125
O	14.858831	10.496205	13.641586
O	16.604809	7.589874	13.583645
O	28.373831	16.408850	5.330480
O	19.661030	3.592884	8.551622
O	7.907854	12.307618	0.472415
O	6.322507	9.242163	0.559784
O	18.015169	4.553679	11.498744
O	12.944989	15.302720	8.690520
O	11.254509	0.622647	0.410914
O	14.651991	0.581131	0.381902
O	12.889553	13.307963	11.484295
O	6.303743	3.550182	8.592658

O	19.745274	9.514424	0.273074
O	17.966122	12.354716	0.438591
O	7.879760	4.540034	11.422194
O	11.032597	13.425778	1.984162
O	18.914246	3.909203	5.105902
O	6.901464	6.377190	1.896353
O	14.864780	6.374145	12.016977
O	11.030303	6.353747	11.998342
O	14.900900	13.418373	1.975974
O	6.970747	3.932507	5.291040
O	19.171230	6.068595	1.965473
O	17.219015	2.796480	1.980216
O	12.948420	9.676869	12.004819
O	8.698430	2.780632	1.972790
O	12.955256	14.598336	5.123910
O	21.652824	5.227593	9.028337
O	17.377359	17.150238	12.106194
O	21.660656	10.307893	1.915259
O	25.839106	17.131950	12.063391
O	27.782419	16.059628	8.999437
O	19.666380	6.539230	12.096261
O	23.558897	13.552929	2.055704
O	15.381257	13.873536	12.102957
O	15.465328	16.008615	9.024467
O	27.657608	13.693664	12.021224
O	19.675213	13.576970	2.037956
O	23.553816	6.502234	12.062486
O	12.960332	12.482728	0.437834
O	19.833544	6.604964	4.507425
O	6.298809	6.301643	4.438801
O	12.954728	4.582916	11.603366
O	10.455894	8.896022	11.552932
O	15.444564	13.909011	4.524026
O	8.661752	2.048057	4.513283
O	17.303120	4.965331	0.439638
O	17.219126	1.954673	4.520690
O	15.448564	8.919641	11.563137
O	8.644881	4.962471	0.484470
O	10.467237	13.925071	4.513391
O	19.168921	6.020733	9.575853
O	17.306198	14.954599	13.578199
O	24.138750	11.008392	2.532629
O	25.949373	17.896381	9.532706
O	28.439833	13.537018	9.505333
O	21.628469	7.459641	13.614387
O	21.626904	15.311492	2.445033
O	14.742747	13.519650	9.551291
O	17.343409	17.809410	9.552191
O	25.909611	14.956109	13.568711
O	19.156946	11.022315	2.421753
O	24.106894	6.050966	9.515678
Al	20.081503	5.115572	5.435660
Si	11.425983	13.003428	0.470357
Si	5.860419	6.915048	3.004146
Si	14.490799	4.795004	12.089520
Si	9.861042	7.476106	12.061661
Si	16.057581	13.872573	3.020970
Si	7.462812	2.414777	5.543729
Si	18.533663	6.030143	0.473029
Si	16.972284	1.537647	2.982853
Si	14.503247	10.133780	12.085739

Si	8.948016	3.368011	0.481231
Si	11.389582	14.833686	5.498479
Si	20.088963	5.168548	8.545417
Si	17.599442	16.551573	13.595662
Si	23.194574	9.800605	2.009819
Si	25.651093	18.385855	11.048145
Si	28.729170	14.819988	8.550207
Si	20.088724	6.943105	13.605250
Si	23.156153	15.123405	1.938866
Si	14.446370	13.031289	11.071645
Si	16.130453	17.411995	8.552700
Si	27.147387	13.904887	13.545171
Si	18.515419	12.445878	1.972137
Si	24.717443	6.041493	11.033654
Si	23.156990	6.914324	13.585488
Si	14.488466	14.790338	8.569029
Si	28.700384	12.980021	11.003666
Si	20.090374	15.142110	1.956650
Si	24.733902	12.436754	2.015316
Si	18.524691	6.043224	11.057742
Si	27.150204	17.482887	8.516553
Si	16.098587	13.874577	13.558379
Si	17.604639	18.361900	11.053869
Si	20.102650	9.842760	1.829373
Si	25.614651	16.553873	13.562385
Si	23.190519	5.104450	8.536736
Si	14.515434	14.812141	5.509668
Si	17.000751	3.366933	0.477286
Si	11.389513	10.134123	12.032194
Si	8.939914	1.545496	2.999092
Si	5.867480	5.116659	5.491814
Si	14.497145	13.002292	0.460145
Si	11.420292	4.781603	12.090294
Si	20.124750	6.940404	2.958091
Si	18.441263	2.437963	5.488828
Si	7.449921	6.052238	0.406788
Si	16.046303	7.488847	12.052701
Si	9.864301	13.891882	3.010982
Rh	20.810658	7.760008	6.359634
Rh	22.897470	8.080975	7.925578
Rh	22.828680	8.936515	5.426097
C	20.976904	9.630396	5.678562
C	20.659388	10.799863	6.565497

CH₃CH/H₅Rh₃

158

generated by VMD

H	23.389729	9.745618	7.056720
H	20.998886	10.760518	7.429593
H	21.170881	8.363888	7.840741
H	22.328671	7.464731	5.954041
H	19.577061	10.852677	6.342923
H	24.266935	10.145350	5.383377
H	21.047165	11.756620	5.939364
H	20.881113	9.727248	4.508643
H	22.468712	9.660952	8.740315
O	10.532600	11.706717	-0.006960
O	19.953079	5.796166	7.078504
O	23.350496	8.521588	3.237602

O	24.186274	18.885366	11.139629
O	8.679526	7.019056	11.100245
O	17.360756	12.722716	3.029559
O	16.771847	17.274973	7.090824
O	18.013895	7.449039	0.116541
O	24.158628	15.975380	2.917000
O	14.831414	11.383151	11.221575
O	10.556684	3.082198	0.094756
O	11.126501	14.302341	7.060205
O	15.522695	3.045594	0.011062
O	14.867632	14.200478	7.084436
O	11.198520	11.291290	10.998816
O	19.211208	15.959267	2.950908
O	8.689731	12.754145	3.028086
O	17.313652	7.029214	11.079717
O	26.613733	17.292349	7.048656
O	16.786715	12.323609	13.896909
O	19.191292	18.840450	11.138309
O	19.892778	8.448702	2.735293
O	24.131104	16.709187	14.053145
O	6.205621	5.575066	7.037405
O	19.949755	19.228378	13.662894
O	21.776411	4.485817	5.315950
O	21.746122	6.518616	2.570260
O	23.394451	19.248135	13.672123
O	26.737679	7.517142	13.631202
O	16.648394	15.259692	2.622166
O	14.953094	16.279222	5.407674
O	28.388752	10.537919	13.563439
O	26.717041	15.286168	2.558053
O	14.908372	10.421432	13.710693
O	16.669333	7.515564	13.624426
O	28.444923	16.350985	5.348866
O	19.726637	3.576055	8.563147
O	7.961765	12.250176	0.504409
O	6.393393	9.120853	0.654757
O	18.084196	4.508757	11.518204
O	13.012589	15.223352	8.714566
O	11.316016	0.539513	0.426698
O	14.716884	0.510799	0.408847
O	12.928453	13.247968	11.520543
O	6.317597	3.469508	8.689056
O	19.808277	9.452173	0.279211
O	18.015408	12.292085	0.467252
O	7.943099	4.475263	11.464111
O	11.094364	13.360246	2.016667
O	18.974178	3.855479	5.131753
O	6.976766	6.356066	1.943548
O	14.921803	6.312812	12.054146
O	11.083058	6.279185	12.026781
O	14.964157	13.323574	2.004057
O	7.012400	3.805236	5.216581
O	19.236082	5.976934	1.988399
O	17.274445	2.731035	2.007527
O	13.001805	9.616492	12.056698
O	8.741338	2.694046	2.024866
O	13.009662	14.509220	5.173169
O	21.716763	5.243490	9.011565
O	17.435999	17.076668	12.142241
O	21.718424	10.223917	1.952084
O	25.917572	17.080172	12.085482

O	27.874056	16.035570	9.036150
O	19.719734	6.503113	12.126087
O	23.616472	13.486514	2.092588
O	15.405439	13.826221	12.177713
O	15.533711	15.925499	9.032658
O	27.688618	13.591422	12.050949
O	19.740782	13.496029	2.061333
O	23.602262	6.431746	12.082987
O	13.016603	12.411073	0.463937
O	19.903034	6.547211	4.521358
O	6.336368	6.204008	4.470640
O	13.014437	4.515392	11.636024
O	10.519259	8.823342	11.574950
O	15.493146	13.799170	4.557280
O	8.738273	1.919297	4.567664
O	17.347672	4.901668	0.470925
O	17.286963	1.892882	4.547581
O	15.503602	8.863587	11.620557
O	8.693750	4.884735	0.547672
O	10.521559	13.865447	4.545004
O	19.232750	5.997433	9.600080
O	17.348722	14.887119	13.633942
O	24.194380	10.943676	2.561970
O	26.023117	17.856947	9.555375
O	28.480711	13.493312	9.540460
O	21.686596	7.389824	13.650713
O	21.685934	15.244102	2.465759
O	14.807095	13.453450	9.614431
O	17.386345	17.741341	9.590648
O	25.967337	14.896091	13.588923
O	19.214148	10.943818	2.437340
O	24.175552	5.982986	9.538318
Al	20.140858	5.060022	5.468411
Si	11.481728	12.931831	0.502763
Si	5.919405	6.858372	3.054052
Si	14.549252	4.732823	12.125474
Si	9.919178	7.406995	12.089779
Si	16.113178	13.778967	3.056296
Si	7.522028	2.314469	5.568262
Si	18.578423	5.965310	0.502198
Si	17.032555	1.471638	3.011374
Si	14.555704	10.073282	12.150516
Si	9.000688	3.290429	0.536840
Si	11.443879	14.771866	5.531554
Si	20.148382	5.154755	8.553924
Si	17.651525	16.482908	13.635484
Si	23.253719	9.719869	2.086661
Si	25.721422	18.336744	11.073789
Si	28.787645	14.771412	8.583645
Si	20.145117	6.876708	13.642832
Si	23.218201	15.056149	1.967441
Si	14.492311	12.975120	11.134364
Si	16.164919	17.355133	8.596104
Si	27.196405	13.834986	13.574442
Si	18.574471	12.370944	1.997257
Si	24.774094	5.970557	11.058364
Si	23.214846	6.841474	13.609953
Si	14.553119	14.702130	8.604515
Si	28.746096	12.909502	11.027266
Si	20.152637	15.062171	1.974075
Si	24.790455	12.368805	2.049707

Si	18.583885	6.002724	11.082373
Si	27.229036	17.449114	8.540981
Si	16.149265	13.797969	13.620872
Si	17.659536	18.290857	11.090590
Si	20.160713	9.767760	1.839231
Si	25.674267	16.494123	13.579059
Si	23.260429	5.040932	8.555640
Si	14.573640	14.698284	5.556430
Si	17.057041	3.299951	0.504210
Si	11.441698	10.070231	12.051795
Si	8.997135	1.449834	3.038411
Si	5.937925	4.993044	5.505314
Si	14.553306	12.930409	0.484035
Si	11.476705	4.707740	12.119411
Si	20.187784	6.867422	2.963627
Si	18.511274	2.379756	5.511930
Si	7.509694	5.987181	0.458129
Si	16.102528	7.428563	12.095335
Si	9.922258	13.825014	3.041179
Rh	20.783968	7.787237	6.307698
Rh	22.878622	8.358348	8.048673
Rh	23.078056	9.090325	5.561355
C	20.681938	10.812438	6.379958
C	21.170443	9.639118	5.573100

CH₃CH/H₇Rh₃

160

generated by VMD

H	23.668879	10.462594	4.908383
H	19.696964	8.071073	5.569446
H	23.651051	10.780099	5.719812
H	19.290651	8.567441	6.137456
H	21.706224	7.902589	8.449364
H	23.443497	9.388213	7.286801
H	21.486460	11.946022	7.883089
H	21.788286	10.478788	8.875801
H	20.121281	11.043570	8.575691
H	20.381458	10.590471	6.116953
H	23.289934	8.992014	8.937819
O	19.117184	16.768602	13.969992
O	20.021358	5.902821	7.054430
O	6.108927	8.524742	2.943356
O	15.409104	3.926888	10.989963
O	8.612426	7.043799	10.902580
O	17.279671	12.840666	2.892946
O	16.745497	17.361595	6.954931
O	26.581959	12.459908	13.974133
O	15.426092	1.042516	2.764398
O	14.817766	11.388079	11.039600
O	19.128887	8.182603	14.032512
O	28.464684	14.388045	6.952963
O	24.074903	8.092309	14.053628
O	14.761681	14.274274	6.939733
O	11.080428	11.375853	10.905112
O	19.128736	16.011261	2.901353
O	25.919714	12.816154	2.962665
O	17.215748	7.023107	10.995769
O	26.449417	17.153421	6.962019

O	16.595053	12.431129	13.982866
O	19.096457	18.874624	11.080014
O	19.726770	8.518661	2.779503
O	24.061293	16.722095	14.043753
O	23.322973	5.634466	6.990709
O	19.881586	19.308414	13.591802
O	21.646883	4.505311	5.220037
O	21.617273	6.657388	2.463682
O	23.334869	19.244545	13.538886
O	26.610199	7.578329	13.436042
O	16.565947	15.379833	2.474231
O	14.862583	16.408640	5.323880
O	28.317169	10.503357	13.423130
O	26.649803	15.336030	2.473543
O	14.789275	10.500785	13.560997
O	16.579460	7.537702	13.534141
O	28.331711	16.415335	5.217968
O	19.509521	3.611679	8.378560
O	7.914890	12.323148	0.417690
O	6.189438	9.367290	0.396029
O	17.989229	4.493992	11.392752
O	12.985348	15.312396	8.642332
O	11.220572	0.658351	0.370963
O	14.594659	0.561225	0.279794
O	12.923852	13.241467	11.398302
O	6.274593	3.461178	8.563341
O	19.721634	9.432143	0.277265
O	17.958984	12.356383	0.348025
O	7.839337	4.512815	11.317719
O	10.980042	13.371598	1.919009
O	18.829500	3.924461	5.280329
O	6.804404	6.154837	1.911316
O	14.814269	6.346643	11.971224
O	10.996439	6.328466	11.901816
O	14.864653	13.433544	1.904547
O	6.919293	3.953326	5.161854
O	19.135714	6.100309	1.786024
O	17.247263	2.771621	1.844103
O	12.927553	9.678439	11.856658
O	8.740972	2.795912	1.894037
O	12.938814	14.627040	5.004926
O	21.588333	5.053931	9.040980
O	17.307789	17.118340	12.033942
O	21.605320	10.231204	1.972885
O	25.748383	17.111572	12.000137
O	27.826271	16.073217	8.964373
O	19.624828	6.480932	12.032188
O	23.535980	13.559740	1.977656
O	15.424342	13.809538	12.008366
O	15.545376	15.933979	8.885012
O	27.729279	13.756169	11.945972
O	19.676731	13.570748	1.947373
O	23.547964	6.501230	11.968040
O	12.931789	12.461402	0.378113
O	19.701685	6.442677	4.343001
O	6.106010	6.379076	4.460146
O	12.917149	4.548854	11.537797
O	10.447584	8.864063	11.380894
O	15.441434	13.944468	4.433426
O	8.622072	2.062470	4.422244
O	17.252518	4.952631	0.312496

O	17.198767	2.007425	4.407045
O	15.429935	8.882640	11.522309
O	8.584005	4.951190	0.364954
O	10.451358	13.907178	4.455441
O	19.135748	6.011614	9.510584
O	17.265516	14.939647	13.540300
O	24.088631	11.011067	2.442195
O	25.882792	17.811642	9.458401
O	28.478065	13.540197	9.421227
O	21.597120	7.453190	13.495116
O	21.613352	15.322061	2.382014
O	14.762723	13.480094	9.457265
O	17.350758	17.780155	9.475527
O	25.923548	14.947935	13.496013
O	19.112715	11.024446	2.358180
O	24.046738	5.997458	9.412465
Al	20.029673	5.142571	5.433968
Si	11.396622	12.984221	0.401985
Si	5.805848	6.910740	2.949717
Si	14.455789	4.762557	12.010690
Si	9.833870	7.459764	11.913775
Si	16.037731	13.900001	2.924824
Si	7.434688	2.444996	5.455320
Si	18.492786	6.008060	0.312360
Si	16.972937	1.544572	2.879766
Si	14.484899	10.113855	12.000350
Si	8.928552	3.367186	0.388190
Si	11.377268	14.850299	5.409564
Si	20.046082	5.143734	8.483944
Si	17.567871	16.535011	13.527453
Si	23.161503	9.776517	1.930833
Si	25.595995	18.345684	10.960059
Si	28.766064	14.838867	8.486493
Si	20.055861	6.943451	13.520971
Si	23.134716	15.128248	1.849239
Si	14.479801	12.980828	10.976789
Si	16.150162	17.376770	8.464761
Si	27.157789	13.893865	13.459448
Si	18.502581	12.451687	1.884691
Si	24.690447	6.017044	10.931328
Si	23.122160	6.900199	13.489316
Si	14.507724	14.750159	8.476254
Si	28.721554	12.980417	10.921954
Si	20.075014	15.142879	1.901066
Si	24.703432	12.433702	1.948550
Si	18.484087	5.997644	10.990036
Si	27.081886	17.424030	8.431838
Si	16.029987	13.883723	13.513195
Si	17.570641	18.326443	10.986578
Si	20.042513	9.796029	1.838235
Si	25.589613	16.535248	13.505723
Si	23.104918	4.989672	8.496065
Si	14.493608	14.818497	5.424201
Si	16.971056	3.353523	0.355090
Si	11.361633	10.109593	11.892912
Si	8.926945	1.551286	2.917198
Si	5.773889	5.088272	5.414606
Si	14.472762	12.968718	0.399655
Si	11.388352	4.759669	12.035933
Si	20.042116	6.911756	2.866191
Si	18.383394	2.413743	5.456597

Si	7.355372	6.011110	0.392159
Si	16.009705	7.445959	12.006775
Si	9.832554	13.867945	2.957104
Rh	20.738819	8.116525	6.976395
Rh	23.287954	7.810832	7.956888
Rh	22.604654	9.420918	5.859457
C	21.023222	10.097675	6.879268
C	21.125450	10.929970	8.126522

CH₂CH/H₂Rh₃

154

generated by VMD

H	21.706583	8.157553	7.740876
H	18.740602	9.166128	5.114226
H	18.326511	9.604625	6.871427
H	20.672356	10.464947	7.231352
H	22.962921	9.586746	6.348899
O	19.166510	16.705013	14.109805
O	19.842207	5.779468	7.128019
O	23.315741	8.560926	3.173531
O	15.462470	3.881140	11.129045
O	8.648534	7.019444	11.129745
O	17.292034	12.745111	3.010121
O	16.710442	17.245817	7.108990
O	17.904186	7.405673	-0.050937
O	24.136238	15.960175	2.921904
O	14.828890	11.374888	11.183982
O	10.494902	3.133018	0.067278
O	11.075395	14.260257	7.084826
O	15.482909	3.053940	0.079885
O	14.876586	14.276387	7.094568
O	11.107553	11.334951	11.087893
O	19.180548	15.994951	3.034240
O	8.640282	12.761900	3.035133
O	17.283499	7.025241	11.141232
O	26.559362	17.244184	7.093516
O	16.732758	12.349730	13.946211
O	19.137157	18.873510	11.153493
O	19.929295	8.551393	2.968029
O	15.461672	11.724225	0.012934
O	6.150603	5.696497	7.079139
O	19.917250	19.236195	13.678970
O	21.710445	4.560664	5.379430
O	21.661983	6.537151	2.667230
O	23.362364	19.240843	13.667374
O	26.692099	7.524689	13.660371
O	16.628222	15.299922	2.639657
O	14.875004	16.329918	5.386918
O	28.376711	10.497223	13.622440
O	26.705400	15.282733	2.588593
O	14.851424	10.459851	13.694057
O	16.595343	7.533026	13.669147
O	28.392075	16.305084	5.382765
O	19.691952	3.544421	8.586947
O	7.949144	12.274588	0.495547
O	6.310610	9.184276	0.569867
O	18.021711	4.494643	11.584375
O	12.968417	15.229948	8.702135
O	11.270603	0.611079	0.503791
O	14.631659	0.528394	0.427726

O	12.933358	13.228495	11.534973
O	6.242661	3.506669	8.608036
O	19.732588	9.319832	0.417226
O	18.017693	12.325534	0.461648
O	7.897119	4.492633	11.558664
O	11.052914	13.338027	2.024114
O	18.926334	3.795422	5.182781
O	6.864714	6.352219	1.954615
O	14.873598	6.318654	12.073349
O	11.055017	6.302240	12.063365
O	14.893767	13.402220	2.027300
O	6.942416	3.863588	5.314814
O	19.153080	6.193907	1.957156
O	17.259199	2.724747	2.051664
O	12.962861	9.648223	12.029428
O	8.738285	2.727714	2.045297
O	12.976778	14.491303	5.212461
O	21.652884	5.252771	9.032857
O	17.407858	17.070564	12.127243
O	21.673204	10.276160	1.951539
O	25.825302	17.071581	12.109395
O	27.829105	16.005636	9.069326
O	19.690083	6.471175	12.171927
O	23.570204	13.488733	2.075165
O	15.429393	13.814210	12.129826
O	15.461792	15.976485	9.093790
O	27.731722	13.723053	12.076631
O	19.688698	13.541660	2.101587
O	23.564878	6.473258	12.122797
O	12.986052	12.414697	0.476961
O	19.697409	6.455241	4.524401
O	6.308499	6.258636	4.499956
O	12.966406	4.524949	11.643179
O	10.475144	8.838476	11.602677
O	15.469360	13.846697	4.573313
O	8.664391	1.991589	4.583891
O	17.322411	4.899171	0.530002
O	17.232147	1.847840	4.589579
O	15.464626	8.862866	11.636055
O	8.619284	4.909956	0.572660
O	10.499289	13.820952	4.558503
O	19.165384	5.951830	9.653847
O	17.321501	14.897351	13.638472
O	24.161167	10.952930	2.531491
O	25.991816	17.850229	9.591201
O	28.476175	13.474898	9.562901
O	21.639250	7.438907	13.678176
O	21.652224	15.253581	2.524483
O	14.772362	13.463986	9.591510
O	17.297403	17.829281	9.601872
O	25.948954	14.918239	13.641209
O	19.167980	10.985126	2.459349
O	24.149969	5.945071	9.593342
Al	20.038139	5.046567	5.508144
Si	11.450113	12.931740	0.507027
Si	5.847928	6.903206	3.085197
Si	14.502268	4.737986	12.127804
Si	9.879838	7.420326	12.120275
Si	16.068384	13.826527	3.065106
Si	7.448771	2.354068	5.594729
Si	18.524023	5.992460	0.484623

Si	17.006273	1.456221	3.040692
Si	14.521167	10.086977	12.135425
Si	8.948730	3.321363	0.550944
Si	11.404616	14.730739	5.558575
Si	20.082884	5.132872	8.595560
Si	17.628342	16.491673	13.625511
Si	23.212250	9.745936	2.023426
Si	25.663326	18.334698	11.100892
Si	28.749680	14.752995	8.599048
Si	20.101482	6.914384	13.674044
Si	23.169930	15.061587	1.982979
Si	14.488118	12.966590	11.109646
Si	16.093729	17.392483	8.606522
Si	27.153521	13.835206	13.586256
Si	18.533108	12.411397	2.007468
Si	24.733150	5.982520	11.109963
Si	23.163391	6.874513	13.645895
Si	14.519291	14.738975	8.615382
Si	28.733171	12.939398	11.067753
Si	20.112989	15.106240	2.039279
Si	24.757254	12.385733	2.033473
Si	18.538715	5.981694	11.141576
Si	27.188986	17.422592	8.577168
Si	16.117800	13.815366	13.597799
Si	17.603909	18.324558	11.115443
Si	20.115339	9.784741	1.926267
Si	25.642227	16.512188	13.619041
Si	23.199631	5.088901	8.594728
Si	14.538950	14.739785	5.566778
Si	17.025663	3.300712	0.551920
Si	11.398515	10.081209	12.087669
Si	8.965462	1.493336	3.073354
Si	5.870597	5.064161	5.541778
Si	14.515758	12.951802	0.513905
Si	11.433466	4.726779	12.136847
Si	20.109091	6.917836	3.050135
Si	18.455978	2.326322	5.557989
Si	7.432983	6.008743	0.478421
Si	16.055328	7.431617	12.130761
Si	9.892616	13.811398	3.056391
Rh	20.558126	7.825026	6.446126
Rh	23.065329	7.947763	6.744285
Rh	21.811653	9.436561	5.024961
C	19.100769	9.408852	6.120237
C	20.422184	9.871240	6.344827

CH₂CH/H₄Rh₃

156

generated by VMD

H	24.653610	8.434182	8.105618
H	23.343231	10.119582	6.100410
H	21.251505	8.196462	7.938590
H	19.571939	10.355990	6.406459
H	21.084982	10.320513	7.486652
H	20.917934	9.635194	4.458719
H	23.055307	9.527969	8.301817
O	19.156069	16.748249	14.073794
O	20.036381	5.822646	7.063111
O	6.106575	8.540103	3.040147

O	15.461849	3.915080	11.073416
O	8.659577	7.035751	11.038630
O	17.318518	12.840296	2.971334
O	16.752344	17.371504	7.030923
O	18.000980	7.484453	0.020655
O	15.451064	1.017420	2.850045
O	14.803700	11.395287	11.113197
O	10.508000	3.174669	-0.042513
O	11.147371	14.349942	7.018244
O	15.465510	3.108325	-0.000669
O	14.809020	14.304427	7.013076
O	11.145568	11.360289	11.009072
O	10.495620	1.001379	2.949265
O	8.629921	12.822007	2.992537
O	17.270113	7.050323	11.056211
O	26.510212	17.262211	7.023142
O	16.670038	12.422173	14.028820
O	10.471599	3.879347	11.108324
O	19.751453	8.519559	2.754046
O	15.437435	11.742405	-0.062182
O	23.359039	5.653098	7.048628
O	19.911139	19.279434	13.631177
O	21.714678	4.528170	5.204902
O	21.647762	6.640046	2.544553
O	23.364231	19.270626	13.612721
O	26.668285	7.555479	13.576759
O	16.600870	15.379673	2.552989
O	14.898973	16.421188	5.366794
O	28.384510	10.546674	13.559067
O	26.686821	15.346850	2.528567
O	14.847272	10.503073	13.631793
O	16.609066	7.549482	13.594708
O	28.371410	16.405415	5.316180
O	19.636805	3.593494	8.467541
O	7.941952	12.324798	0.453662
O	6.239126	9.306727	0.483064
O	18.031506	4.523941	11.484987
O	12.996234	15.298529	8.703979
O	11.251459	0.650806	0.411292
O	14.646017	0.571289	0.353788
O	12.938608	13.280691	11.472823
O	6.236725	3.473638	8.586607
O	19.768520	9.499564	0.285187
O	17.981770	12.350362	0.419081
O	7.902926	4.514972	11.502878
O	11.038665	13.398863	1.978639
O	18.880016	3.903588	5.182714
O	6.855457	6.184284	1.964610
O	14.867603	6.349614	12.014501
O	11.055178	6.336316	12.001807
O	14.914226	13.425353	1.965093
O	6.974245	3.971589	5.208072
O	19.157839	6.049064	1.961266
O	17.249323	2.790519	1.964001
O	12.961800	9.654786	11.985920
O	8.767860	2.792043	1.959099
O	12.975220	14.627249	5.085772
O	21.640690	5.180188	9.097737
O	17.404886	17.096706	12.083373
O	21.645391	10.242367	2.007879
O	25.827206	17.111519	12.057985

O	27.836262	16.057503	9.000146
O	19.690519	6.503520	12.066923
O	23.566004	13.548426	2.027419
O	15.451112	13.804463	12.081850
O	15.545898	15.964252	8.973077
O	27.713802	13.709684	12.016020
O	19.703463	13.574929	2.000344
O	23.579084	6.510644	12.047368
O	12.975505	12.461908	0.440232
O	19.816998	6.575253	4.509777
O	6.163752	6.421848	4.531195
O	12.964658	4.552468	11.594119
O	10.468762	8.877247	11.543529
O	15.470264	13.943427	4.503408
O	8.669271	2.066998	4.495346
O	17.311117	4.952643	0.413246
O	17.217299	1.951357	4.503043
O	15.467307	8.894604	11.581191
O	8.639897	4.948411	0.446900
O	10.486753	13.913585	4.509326
O	19.144127	5.997910	9.543003
O	17.299990	14.937569	13.609485
O	24.142639	11.007808	2.486290
O	25.967880	17.862377	9.527866
O	28.488365	13.528207	9.499108
O	21.639151	7.460484	13.582362
O	21.642183	15.317463	2.430529
O	14.786403	13.493613	9.531763
O	17.319263	17.847815	9.550719
O	25.938696	14.940644	13.564351
O	19.154425	11.029924	2.416929
O	24.132748	5.927402	9.534348
Al	20.079191	5.090622	5.428900
Si	11.439065	12.978939	0.465682
Si	5.839713	6.904107	2.991204
Si	14.500624	4.767820	12.074088
Si	9.875833	7.452023	12.042844
Si	16.073597	13.897958	2.997537
Si	7.473398	2.454664	5.520126
Si	18.547403	6.008829	0.455916
Si	16.991756	1.530342	2.962247
Si	14.514578	10.112935	12.076176
Si	8.967941	3.358795	0.453665
Si	11.410635	14.834345	5.483669
Si	20.105848	5.152380	8.545677
Si	17.617550	16.530842	13.588993
Si	23.200335	9.792498	1.987676
Si	25.659273	18.361931	11.036982
Si	28.780779	14.815565	8.549186
Si	20.101536	6.943667	13.571540
Si	23.166971	15.119205	1.912820
Si	14.490759	12.993509	11.049033
Si	16.133596	17.412901	8.535683
Si	27.181211	13.895183	13.535231
Si	18.531500	12.456300	1.950859
Si	24.743290	6.001481	11.041436
Si	23.167196	6.912149	13.566073
Si	14.530763	14.766014	8.550723
Si	28.741858	12.970536	10.999813
Si	20.105675	15.145343	1.946366
Si	24.746490	12.437611	1.991437

Si	18.531799	6.016126	11.042840
Si	27.155764	17.451038	8.499169
Si	16.080120	13.870828	13.575106
Si	17.610529	18.345295	11.066678
Si	20.080450	9.823457	1.850792
Si	25.625666	16.534716	13.559856
Si	23.165859	5.044331	8.567523
Si	14.531687	14.830630	5.492975
Si	17.010946	3.353596	0.459724
Si	11.402748	10.112597	12.026444
Si	8.963350	1.552199	2.987378
Si	5.833875	5.100196	5.495000
Si	14.512012	12.979878	0.456797
Si	11.431892	4.760379	12.086604
Si	20.081116	6.939227	2.964500
Si	18.423405	2.410314	5.498672
Si	7.421090	6.012136	0.444745
Si	16.053802	7.457363	12.061092
Si	9.876911	13.878855	3.007146
Rh	20.627092	7.842937	6.490003
Rh	23.151968	8.067249	7.827381
Rh	23.114990	8.718809	5.495224
C	20.588995	9.977654	6.577900
C	21.317022	9.500591	5.472065

CH₂CH/H₆Rh₃

158

generated by VMD

H	23.233786	9.521497	7.239387
H	20.743589	8.312560	7.979103
H	21.980616	9.672881	8.938852
H	22.057503	7.572045	6.757656
H	19.433086	10.233418	5.959542
H	23.588619	10.532314	5.695030
H	20.751904	10.372309	7.262873
H	21.066280	9.389496	4.339911
H	23.664948	8.915812	9.351426
O	19.171515	16.701483	14.064526
O	19.962240	5.768517	7.030125
O	23.475412	8.517280	3.128672
O	24.165573	18.886311	11.060907
O	8.670150	7.007693	11.032270
O	17.347666	12.763321	2.956291
O	16.736763	17.370638	7.021115
O	18.023638	7.441471	0.042625
O	24.141329	15.984127	2.831476
O	14.825296	11.360635	11.146465
O	10.536173	3.118459	-0.012571
O	11.146774	14.302652	6.998285
O	15.507723	3.047533	-0.049588
O	14.829424	14.190806	7.004315
O	11.185172	11.296862	10.965731
O	19.188599	15.952378	2.924279
O	8.659746	12.774752	2.964849
O	17.291555	7.011399	11.036968
O	26.569683	17.246212	7.002456
O	16.718342	12.347613	13.965377
O	19.171562	18.830290	11.083528
O	19.752735	8.460815	2.712949

O	24.114309	16.688120	14.022264
O	6.117256	5.518503	7.005399
O	19.939882	19.226450	13.604464
O	21.723040	4.468125	5.218093
O	21.693110	6.626040	2.542462
O	23.381926	19.222054	13.596771
O	26.720667	7.513645	13.567988
O	16.620611	15.298585	2.550927
O	14.931493	16.312618	5.370252
O	28.395191	10.515895	13.523481
O	26.708298	15.298856	2.494598
O	14.868379	10.438147	13.654949
O	16.647615	7.496395	13.584588
O	28.410946	16.356647	5.291626
O	19.704527	3.551010	8.470994
O	7.949903	12.257420	0.438662
O	6.313677	9.205223	0.543265
O	18.060970	4.488663	11.479481
O	13.020581	15.225221	8.672974
O	11.282227	0.588221	0.385109
O	14.676455	0.521681	0.329232
O	12.942232	13.240764	11.457534
O	6.225165	3.405696	8.650230
O	19.803074	9.450516	0.246610
O	17.999741	12.298354	0.397639
O	7.938134	4.478490	11.467780
O	11.072242	13.358246	1.957110
O	18.899523	3.850233	5.110627
O	6.902816	6.213633	1.956995
O	14.897940	6.304000	12.004586
O	11.069713	6.276619	11.967100
O	14.944842	13.344453	1.940565
O	6.966623	3.854223	5.099103
O	19.214390	5.973434	1.941887
O	17.263687	2.741902	1.948016
O	12.989456	9.604247	11.989588
O	8.768741	2.717646	1.965010
O	12.994637	14.543341	5.080976
O	21.681307	5.226471	9.012232
O	17.421917	17.055252	12.073979
O	21.679256	10.162129	1.989327
O	25.869459	17.063498	12.028376
O	27.871508	16.018406	8.981792
O	19.708302	6.483293	12.059839
O	23.590061	13.501647	2.007526
O	15.434790	13.785077	12.103932
O	15.571174	15.892047	8.930231
O	27.710920	13.620170	11.997241
O	19.729849	13.514215	1.976602
O	23.583189	6.441801	12.008634
O	12.998582	12.403334	0.413952
O	19.846306	6.536973	4.491247
O	6.194559	6.328183	4.520835
O	12.993937	4.507664	11.569098
O	10.503587	8.822175	11.518212
O	15.482445	13.839113	4.486429
O	8.704609	1.958166	4.504319
O	17.337896	4.902280	0.405956
O	17.246635	1.878914	4.488270
O	15.495636	8.854802	11.586594
O	8.657665	4.887734	0.474887

O	10.502583	13.871418	4.485253
O	19.178541	5.958217	9.538510
O	17.330408	14.882086	13.590813
O	24.161160	10.970095	2.499262
O	26.016796	17.841789	9.506063
O	28.493614	13.480512	9.479585
O	21.667818	7.412201	13.572382
O	21.666397	15.263731	2.405777
O	14.811876	13.438263	9.541199
O	17.335489	17.777670	9.537652
O	25.965509	14.890031	13.540118
O	19.189327	10.970892	2.384863
O	24.189880	5.887462	9.480955
Al	20.092787	5.032687	5.397714
Si	11.464604	12.928857	0.443859
Si	5.884312	6.880408	3.020898
Si	14.528021	4.722141	12.057573
Si	9.901604	7.402818	12.024948
Si	16.095779	13.813465	2.983669
Si	7.487582	2.369521	5.496583
Si	18.574369	5.957457	0.445235
Si	17.012829	1.476979	2.942118
Si	14.539916	10.066557	12.094307
Si	8.988987	3.299640	0.467035
Si	11.431164	14.780424	5.464797
Si	20.128450	5.123800	8.522539
Si	17.635521	16.478060	13.574179
Si	23.241310	9.729272	2.026303
Si	25.696115	18.323841	11.019502
Si	28.798498	14.763160	8.527514
Si	20.128431	6.900016	13.568885
Si	23.191488	15.070902	1.887614
Si	14.501692	12.955545	11.061445
Si	16.133972	17.360830	8.532654
Si	27.202017	13.837164	13.519616
Si	18.558495	12.395497	1.926602
Si	24.763186	5.961253	11.003084
Si	23.193995	6.856215	13.531289
Si	14.555011	14.688227	8.532770
Si	28.753780	12.911278	10.974886
Si	20.131451	15.084881	1.921291
Si	24.766317	12.387795	1.978038
Si	18.557467	5.981848	11.035617
Si	27.207314	17.420063	8.483443
Si	16.114738	13.809834	13.577651
Si	17.633457	18.294008	11.046005
Si	20.112156	9.764303	1.815752
Si	25.652760	16.483860	13.528257
Si	23.217840	4.991280	8.530762
Si	14.554504	14.726434	5.486232
Si	17.042625	3.300978	0.438983
Si	11.430193	10.061753	12.001780
Si	8.982943	1.472255	2.983293
Si	5.867904	5.005419	5.458636
Si	14.535492	12.920735	0.428017
Si	11.457392	4.703910	12.058039
Si	20.119110	6.890580	2.937273
Si	18.459724	2.359907	5.465758
Si	7.453140	5.968973	0.445301
Si	16.082752	7.414180	12.054379
Si	9.902707	13.834307	2.979261

Rh	20.467037	7.782571	6.457018
Rh	22.570627	8.369662	8.339800
Rh	23.244761	9.020646	5.636157
C	20.428900	9.933353	6.317008
C	21.360481	9.436838	5.395326

CH₂CH/H₈Rh₃

160

generated by VMD

H	24.248018	9.446055	5.622426
H	20.923271	8.396359	10.290925
H	22.708199	9.110087	7.903985
H	19.965059	8.382914	7.956425
H	21.311546	9.691217	9.048759
H	21.875048	7.356113	7.097031
H	19.475266	10.329195	5.563341
H	23.904715	9.918056	6.248859
H	20.383747	10.389107	7.186859
H	21.397211	9.223989	4.482175
H	22.620096	8.448999	10.007980
O	19.208096	16.716198	13.977977
O	19.734129	5.717717	6.999394
O	6.206005	8.509221	2.950573
O	24.184061	18.881598	10.972804
O	8.683847	7.050410	11.032123
O	17.339836	12.787938	2.871521
O	16.642752	17.463009	6.976866
O	18.044357	7.439878	-0.038168
O	24.186005	15.963868	2.825362
O	14.840150	11.342710	11.022502
O	10.529156	3.140792	-0.101489
O	11.151214	14.228138	6.957856
O	24.190847	8.074835	14.085914
O	14.912849	14.260615	6.953746
O	11.201215	11.330963	11.001186
O	19.229391	15.988264	2.946361
O	8.685758	12.788387	2.908221
O	17.363377	7.043346	11.068958
O	26.662123	17.372404	6.966015
O	16.720949	12.413353	14.043336
O	19.179775	18.870260	11.018154
O	19.796360	8.524842	2.792982
O	24.171192	16.711113	14.034500
O	6.334895	5.556648	6.957186
O	19.987606	19.236338	13.537172
O	21.756876	4.537073	5.374578
O	21.695827	6.656797	2.502090
O	23.404421	19.215666	13.506608
O	26.746191	7.511903	13.569686
O	16.669758	15.343908	2.500144
O	14.912045	16.352999	5.280836
O	28.455313	10.512367	13.551570
O	26.759928	15.310815	2.464336
O	14.908274	10.513880	13.566135
O	16.617031	7.512980	13.591738
O	28.444305	16.312418	5.293592
O	19.858456	3.518669	8.503670
O	7.996078	12.296041	0.372475
O	6.274357	9.325900	0.392382

O	18.046343	4.501158	11.526126
O	13.027729	15.198747	8.596485
O	11.317961	0.645109	0.407679
O	14.681067	0.559811	0.326314
O	13.009181	13.257380	11.393330
O	6.157888	3.498863	8.648202
O	19.824671	9.429881	0.289741
O	18.074955	12.318851	0.335540
O	7.957861	4.519942	11.467834
O	11.096739	13.358983	1.886688
O	19.002661	3.803447	4.938864
O	6.877358	6.119663	1.932394
O	14.941029	6.302614	11.934402
O	11.092356	6.302558	11.933459
O	14.944782	13.434793	1.880010
O	6.956890	3.891091	4.967936
O	19.198494	6.061396	1.940352
O	17.285900	2.749671	1.949962
O	13.018849	9.617251	11.957966
O	8.837466	2.761117	1.943153
O	13.025967	14.509781	5.067821
O	21.692348	5.447913	8.815588
O	17.444216	17.078176	11.999322
O	21.706972	10.204976	1.991077
O	25.866034	17.057522	11.985573
O	27.883249	15.993212	8.901770
O	19.779924	6.434223	12.053115
O	23.613747	13.504856	1.951172
O	15.528090	13.723905	12.026367
O	15.527539	15.978125	8.910566
O	27.802349	13.694493	11.994346
O	19.744011	13.555786	1.966115
O	23.600807	6.477272	12.012878
O	13.033702	12.408123	0.358831
O	19.892200	6.541692	4.480684
O	6.172386	6.385863	4.483512
O	13.013853	4.535948	11.482818
O	10.518627	8.854226	11.533504
O	15.517988	13.883751	4.428380
O	8.710697	1.986232	4.486141
O	17.380758	4.909226	0.400805
O	17.285126	1.849696	4.484966
O	15.522850	8.858143	11.550130
O	8.675251	4.915019	0.415101
O	10.546143	13.841696	4.427444
O	19.176781	5.889803	9.552332
O	17.353209	14.909314	13.526618
O	24.206247	10.976486	2.420380
O	26.119083	17.885500	9.484189
O	28.508198	13.472798	9.462076
O	21.689192	7.465112	13.570936
O	21.701811	15.268520	2.421851
O	14.872951	13.471441	9.472713
O	17.294062	17.869936	9.480225
O	26.009459	14.907380	13.524302
O	19.211050	11.015190	2.376291
O	24.205070	5.945724	9.486303
Al	20.098543	5.031988	5.380342
Si	11.499871	12.936475	0.374187
Si	5.899300	6.902145	2.960913
Si	14.552366	4.725395	11.971889

Si	9.923204	7.425682	12.022681
Si	16.114595	13.865961	2.919365
Si	7.460172	2.417704	5.429384
Si	18.603748	5.978797	0.429703
Si	17.051828	1.471107	2.930525
Si	14.571917	10.084609	12.024877
Si	8.999540	3.324989	0.429297
Si	11.458159	14.733747	5.435860
Si	20.111929	5.130105	8.475664
Si	17.665674	16.502285	13.500970
Si	23.265877	9.752621	1.926305
Si	25.722839	18.333700	10.990476
Si	28.809441	14.727910	8.474795
Si	20.159233	6.924893	13.550760
Si	23.217510	15.077768	1.874952
Si	14.560016	12.948261	10.979212
Si	16.068768	17.452419	8.499985
Si	27.247211	13.856353	13.508404
Si	18.584383	12.429500	1.882162
Si	24.777620	6.000979	11.004754
Si	23.210802	6.896941	13.531979
Si	14.583502	14.726669	8.480554
Si	28.803593	12.939068	10.964893
Si	20.163998	15.121483	1.933953
Si	24.800352	12.401196	1.909735
Si	18.590675	5.970881	11.057540
Si	27.297867	17.444122	8.456570
Si	16.131939	13.841595	13.526536
Si	17.637266	18.340343	10.995090
Si	20.140652	9.797513	1.845713
Si	25.695478	16.500713	13.500560
Si	23.261295	5.105762	8.471266
Si	14.585690	14.758219	5.433648
Si	17.074266	3.311091	0.439823
Si	11.463701	10.081364	12.015021
Si	9.023342	1.513610	2.966075
Si	5.922204	5.061982	5.436524
Si	14.563855	12.946924	0.378450
Si	11.482346	4.727947	11.993051
Si	20.140055	6.938856	2.933510
Si	18.525621	2.358307	5.414360
Si	7.463697	5.990170	0.421275
Si	16.110294	7.424841	12.039208
Si	9.940532	13.833267	2.922871
Rh	20.189249	7.773110	6.448662
Rh	21.566999	8.189525	8.875965
Rh	22.954998	8.464250	6.368455
C	20.284708	9.942856	6.196498
C	21.352371	9.275747	5.581477

CH₃C/H₂Rh₃

154

generated by VMD

H	19.419460	11.513473	5.923019
H	18.502819	10.220286	6.762479
H	18.729797	10.160723	4.987721
H	22.996620	9.639764	6.356234
H	21.570801	8.080126	7.765087
O	19.222103	16.798485	14.085239

O	19.952969	5.774936	7.100714
O	23.359594	8.632961	3.116607
O	15.502605	3.942102	11.136070
O	8.693194	7.128259	11.124643
O	17.338850	12.828801	3.031895
O	16.731310	17.388733	7.095854
O	17.969086	7.491568	-0.006215
O	24.177547	16.018490	2.916574
O	14.842910	11.446151	11.157127
O	10.544276	3.195418	0.048558
O	11.166356	14.312755	7.082718
O	15.521499	3.144277	0.071053
O	14.885913	14.378148	7.078330
O	11.178778	11.430000	11.144096
O	10.567056	1.080472	3.005503
O	8.673859	12.858994	3.039111
O	17.335442	7.124899	11.122949
O	26.591164	17.385721	7.088481
O	16.804377	12.452453	13.983614
O	10.519641	3.944427	11.152933
O	20.014242	8.637436	2.981551
O	15.503989	11.813087	0.006275
O	6.109869	5.690952	7.059589
O	19.965744	19.334827	13.681483
O	21.774431	4.555031	5.280972
O	21.714193	6.614765	2.595274
O	23.409107	19.333961	13.669048
O	26.726854	7.598265	13.672034
O	16.691566	15.382552	2.621197
O	14.921126	16.445292	5.375934
O	28.441019	10.586418	13.685759
O	26.757874	15.373994	2.588984
O	14.927948	10.571273	13.682779
O	16.642542	7.615103	13.657104
O	28.410505	16.387564	5.412203
O	19.751755	3.598979	8.622436
O	8.013232	12.374214	0.490411
O	6.346633	9.286722	0.521367
O	18.057302	4.588850	11.567280
O	13.011222	15.324600	8.731977
O	11.309102	0.670693	0.470106
O	14.697723	0.607738	0.409568
O	12.997674	13.344234	11.539039
O	6.282386	3.587435	8.692269
O	19.767740	9.427276	0.444425
O	18.061771	12.387304	0.485222
O	7.950321	4.593739	11.518023
O	11.087358	13.416386	2.019624
O	18.948599	3.874287	5.112374
O	6.938313	6.395108	1.971948
O	14.932896	6.395971	12.053709
O	11.094110	6.395356	12.061721
O	14.949920	13.486342	2.025633
O	7.022165	3.979151	5.227266
O	19.165421	6.267951	2.036493
O	17.281731	2.806660	2.060061
O	13.011439	9.720804	12.080854
O	8.781193	2.818875	2.034842
O	13.018821	14.613824	5.171446
O	21.696878	5.333678	9.089061
O	17.445742	17.172968	12.117584

O	21.729366	10.379609	1.933725
O	25.891882	17.160818	12.125470
O	27.844503	16.061056	9.030089
O	19.742554	6.552641	12.135177
O	23.604118	13.557433	2.056293
O	15.521468	13.860541	12.103120
O	15.529119	16.053402	9.070937
O	27.789230	13.811771	12.105179
O	19.727226	13.628930	2.108426
O	23.617498	6.566206	12.103122
O	13.032853	12.509723	0.480079
O	19.875490	6.573302	4.582644
O	6.266393	6.392986	4.526337
O	13.012058	4.617683	11.644304
O	10.513913	8.944739	11.651126
O	15.515944	13.959480	4.568952
O	8.721420	2.061418	4.579720
O	17.372515	4.980424	0.549270
O	17.251015	1.913835	4.595803
O	15.506969	8.947523	11.631084
O	8.691992	4.993134	0.547159
O	10.540860	13.908729	4.559122
O	19.187572	6.028006	9.611300
O	17.372860	14.995229	13.622257
O	24.225443	11.025885	2.505945
O	26.034241	17.913597	9.599159
O	28.523306	13.554975	9.582351
O	21.685637	7.502612	13.661203
O	21.696590	15.337075	2.490084
O	14.820457	13.546680	9.573154
O	17.368580	17.898468	9.586711
O	25.983681	14.993138	13.645759
O	19.223415	11.074594	2.500093
O	24.193293	6.060338	9.562031
Al	20.124714	5.053493	5.474173
Si	11.495840	13.024324	0.501273
Si	5.894715	6.967797	3.069020
Si	14.549924	4.819392	12.125064
Si	9.917547	7.512399	12.130165
Si	16.119862	13.919779	3.064386
Si	7.497413	2.474184	5.568931
Si	18.574804	6.074274	0.537091
Si	17.040201	1.530662	3.041216
Si	14.568917	10.172520	12.138162
Si	9.001446	3.399944	0.536552
Si	11.451681	14.816574	5.557040
Si	20.149202	5.187119	8.603057
Si	17.680065	16.589800	13.609763
Si	23.262657	9.835120	1.983645
Si	25.709793	18.411966	11.104577
Si	28.801811	14.822454	8.601026
Si	20.147646	6.978419	13.645543
Si	23.215960	15.133574	1.960685
Si	14.541747	13.047074	11.091945
Si	16.137730	17.490837	8.607221
Si	27.201836	13.922407	13.611774
Si	18.578466	12.491964	2.027759
Si	24.779942	6.083605	11.074153
Si	23.216471	6.953948	13.627812
Si	14.561659	14.832493	8.608863
Si	28.794224	13.035501	11.093135

Si	20.155003	15.190681	2.014474
Si	24.806742	12.470318	2.022623
Si	18.581009	6.069040	11.109642
Si	27.229187	17.500265	8.576370
Si	16.180485	13.901148	13.583059
Si	17.654448	18.417730	11.095275
Si	20.175159	9.883487	1.949651
Si	25.687918	16.590467	13.628068
Si	23.234734	5.173299	8.583497
Si	14.576855	14.858842	5.550195
Si	17.061983	3.382329	0.558069
Si	11.452846	10.172401	12.144388
Si	9.017684	1.584027	3.062229
Si	5.906498	5.139191	5.526083
Si	14.563326	13.043053	0.512903
Si	11.478088	4.820523	12.136580
Si	20.190325	7.008795	3.057216
Si	18.477776	2.416206	5.548018
Si	7.506575	6.095002	0.484098
Si	16.105785	7.516975	12.117596
Si	9.934957	13.898644	3.055933
Rh	20.706718	7.739295	6.346792
Rh	21.759190	9.805445	7.584405
Rh	22.025463	9.445611	4.991650
C	20.472240	9.656307	6.122107
C	19.208788	10.431097	5.942538

CH₃C/H₄Rh₃

156

generated by VMD

H	19.279228	8.369596	7.739877
H	20.769436	10.927720	8.594673
H	21.406569	9.087807	8.290303
H	18.841255	11.145298	5.264236
H	18.224773	10.310179	6.729203
H	18.285202	9.458765	5.147594
H	22.674433	9.704578	5.930122
O	19.209349	16.825396	14.096439
O	20.050163	5.912146	7.134088
O	23.238207	8.606619	3.103568
O	15.510414	3.958543	11.105565
O	8.681123	7.130280	11.103210
O	17.347689	12.822798	3.012921
O	16.766367	17.404154	7.085928
O	26.547606	12.441102	13.917629
O	15.495431	1.056147	2.908467
O	14.895355	11.444266	11.167972
O	10.556950	3.198846	0.028442
O	28.497799	14.398470	7.079771
O	15.540842	3.094943	0.056775
O	14.916523	14.344789	7.069237
O	11.175178	11.439947	11.111251
O	19.237770	16.042803	3.036726
O	8.712929	12.797676	3.044042
O	17.346024	7.111676	11.138009
O	26.585575	17.221586	7.102698
O	16.808258	12.436334	13.985450
O	19.207487	18.913527	11.169630
O	20.127710	8.631481	3.032101

O	15.500686	11.789369	0.002235
O	6.046013	5.713978	7.063967
O	19.981960	19.355257	13.686560
O	21.729395	4.555935	5.299523
O	21.684616	6.532918	2.531206
O	23.429657	19.310713	13.649534
O	26.759851	7.620423	13.628120
O	16.687813	15.382312	2.624138
O	14.942721	16.432274	5.391705
O	28.412949	10.543730	13.624418
O	26.715643	15.341805	2.606890
O	14.925425	10.557477	13.692063
O	16.650684	7.603900	13.669545
O	28.428789	16.419914	5.340117
O	19.716534	3.626403	8.498821
O	7.988733	12.346377	0.504995
O	6.367540	9.271627	0.541149
O	18.065374	4.573756	11.578878
O	13.059216	15.315975	8.721807
O	11.294249	0.671563	0.490533
O	14.704037	0.566387	0.410534
O	13.027541	13.321465	11.514747
O	6.292815	3.569252	8.659451
O	19.708494	9.290403	0.479110
O	18.058495	12.379762	0.459741
O	7.978086	4.589712	11.521936
O	11.103469	13.440395	2.026007
O	18.916456	3.927193	5.329911
O	6.938637	6.393301	1.980715
O	14.936735	6.393970	12.063064
O	11.087595	6.376374	12.013716
O	14.959060	13.478439	2.010883
O	6.990680	3.982147	5.247571
O	19.114517	6.416549	1.886227
O	17.328312	2.789803	2.022562
O	13.025231	9.738652	12.043207
O	8.829242	2.801716	2.032320
O	13.030337	14.618508	5.180920
O	21.696014	5.288930	9.126084
O	17.426916	17.158274	12.128029
O	21.706934	10.392473	1.848930
O	25.867897	17.154076	12.103040
O	27.924547	16.100140	9.101185
O	19.759083	6.527575	12.142850
O	23.648684	13.567862	2.118392
O	15.534785	13.867793	12.115649
O	15.571856	16.038034	9.046295
O	27.843946	13.859800	12.068759
O	19.743000	13.592843	2.088135
O	23.612183	6.524417	12.096855
O	13.031192	12.511609	0.473995
O	19.764769	6.484955	4.451353
O	6.190958	6.394584	4.522003
O	13.020824	4.612114	11.638430
O	10.544698	8.924196	11.566758
O	15.518902	13.944833	4.556239
O	8.720442	2.084778	4.569234
O	17.345142	4.971179	0.517281
O	17.272499	1.977149	4.571711
O	15.520954	8.940087	11.641689
O	8.690858	4.982153	0.561882

O	10.551989	13.913475	4.567853
O	19.186184	6.005779	9.621287
O	17.392973	14.982746	13.640610
O	24.198395	11.008337	2.528106
O	26.054733	17.925125	9.585793
O	28.559202	13.557430	9.549199
O	21.698580	7.471432	13.674936
O	21.702171	15.312124	2.492396
O	14.869158	13.537053	9.573234
O	17.377115	17.896023	9.590147
O	25.991140	14.990059	13.607505
O	19.198248	11.034399	2.462664
O	24.197418	6.029173	9.555061
Al	20.105722	5.148141	5.500006
Si	11.498158	13.041458	0.506040
Si	5.843480	6.938678	3.040542
Si	14.558657	4.815543	12.114058
Si	9.928475	7.511002	12.081455
Si	16.125015	13.911965	3.052693
Si	7.502516	2.481481	5.569908
Si	18.526741	6.079864	0.421132
Si	17.044107	1.545807	3.034209
Si	14.586107	10.171563	12.138556
Si	9.019064	3.393548	0.536108
Si	11.460789	14.851755	5.541996
Si	20.154274	5.191405	8.601397
Si	17.671791	16.583332	13.623678
Si	23.233118	9.826551	1.987156
Si	25.711369	18.413094	11.090012
Si	28.839024	14.851069	8.603987
Si	20.156105	6.966925	13.652669
Si	23.230173	15.131907	1.975950
Si	14.580258	13.041097	11.091596
Si	16.163382	17.484148	8.594174
Si	27.181509	13.894407	13.547873
Si	18.578457	12.470995	2.001979
Si	24.784197	6.067049	11.067828
Si	23.224333	6.911675	13.625411
Si	14.604327	14.812514	8.598423
Si	28.822353	13.040247	11.062105
Si	20.159645	15.162581	2.023075
Si	24.813993	12.441887	2.050054
Si	18.588797	6.054589	11.125336
Si	27.237400	17.478249	8.564946
Si	16.195553	13.893060	13.596773
Si	17.663799	18.397495	11.104287
Si	20.169615	9.852061	1.927161
Si	25.680716	16.582222	13.605864
Si	23.228638	5.150101	8.584707
Si	14.593205	14.845007	5.549681
Si	17.079025	3.365918	0.525801
Si	11.458197	10.162802	12.085009
Si	9.030478	1.569909	3.067294
Si	5.861439	5.133333	5.528964
Si	14.566672	13.029007	0.501369
Si	11.485861	4.808586	12.129892
Si	20.161242	6.956214	2.992539
Si	18.482716	2.420759	5.575549
Si	7.506114	6.084511	0.491509
Si	16.114687	7.509329	12.130024
Si	9.937738	13.882101	3.067815

Rh	20.633390	8.008881	7.125268
Rh	21.517317	10.408326	7.287632
Rh	21.545521	9.212007	4.837583
C	20.187967	9.703169	6.083655
C	18.800854	10.182490	5.800553

CH₃C/H₆Rh₃

158

generated by VMD

H	19.348434	8.139401	8.281206
H	20.783344	11.082806	8.707905
H	20.757137	11.789232	8.182337
H	21.206406	8.915986	8.057469
H	18.904118	11.431581	5.113879
H	18.108515	10.727982	6.558770
H	18.157204	9.815922	5.023228
H	22.573586	9.932753	5.893565
H	21.652321	7.995049	5.652376
O	19.222242	16.795603	14.097445
O	19.964800	5.895879	7.141513
O	23.265219	8.595800	3.095480
O	15.515572	3.923979	11.105383
O	8.694067	7.104340	11.120687
O	17.358719	12.801926	3.009740
O	16.743099	17.424509	7.085394
O	26.564430	12.414091	13.900220
O	24.183409	16.039398	2.928355
O	14.911867	11.418721	11.157880
O	10.558079	3.186846	0.035324
O	11.171064	14.366351	7.084102
O	15.549776	3.094124	0.069605
O	14.927481	14.320877	7.071671
O	11.170466	11.424424	11.127951
O	19.244200	16.021799	3.054571
O	8.714508	12.789309	3.046379
O	17.361568	7.085792	11.155933
O	26.609699	17.224771	7.108533
O	16.803123	12.421770	14.005078
O	10.540535	3.890363	11.169957
O	20.137520	8.636993	3.054877
O	15.512242	11.761392	0.012442
O	23.486170	5.665512	7.069240
O	19.989759	19.326248	13.689609
O	21.733442	4.599107	5.332320
O	21.680473	6.529397	2.588817
O	23.440056	19.280924	13.650382
O	26.767221	7.597366	13.645571
O	16.697441	15.360044	2.624173
O	14.941848	16.405214	5.393014
O	28.438616	10.521453	13.640277
O	26.737320	15.326618	2.605986
O	14.929021	10.539072	13.683852
O	16.648836	7.586087	13.679946
O	28.447464	16.392307	5.352117
O	19.767097	3.595127	8.503447
O	8.004692	12.332979	0.503755
O	6.357789	9.271728	0.526674
O	18.052706	4.549156	11.640844
O	13.069744	15.299274	8.722126

O	11.314402	0.666051	0.512933
O	14.704993	0.568075	0.430992
O	13.040442	13.289707	11.521137
O	6.282626	3.552489	8.709270
O	19.736500	9.245554	0.476852
O	18.067360	12.376987	0.450756
O	7.977986	4.566467	11.533228
O	11.110352	13.410519	2.029218
O	18.944418	3.896946	5.292755
O	6.916468	6.361915	1.981632
O	14.947795	6.364053	12.065576
O	11.104367	6.360730	12.032935
O	14.967229	13.455920	2.014341
O	6.972563	3.952315	5.193178
O	19.126808	6.434814	1.887529
O	17.330235	2.771938	2.038970
O	13.033041	9.721626	12.030518
O	8.837925	2.780917	2.041177
O	13.040122	14.581001	5.182380
O	21.703407	5.310191	9.080918
O	17.443287	17.136793	12.126129
O	21.714861	10.383175	1.876761
O	25.866318	17.112106	12.098481
O	27.929811	16.074417	9.100480
O	19.769064	6.501793	12.164208
O	23.649794	13.547593	2.108549
O	15.549373	13.840161	12.113214
O	15.586767	16.019012	9.040908
O	27.858765	13.854841	12.066209
O	19.755142	13.577034	2.093639
O	23.624315	6.514065	12.116853
O	13.041423	12.484660	0.478815
O	19.714930	6.482850	4.469087
O	6.224995	6.397082	4.537400
O	13.028450	4.586115	11.642261
O	10.547454	8.906864	11.584753
O	15.533433	13.920767	4.559741
O	8.721111	2.055017	4.579721
O	17.370543	4.952794	0.535802
O	17.289116	1.942742	4.585923
O	15.527506	8.911635	11.641469
O	8.687223	4.963568	0.571139
O	10.559175	13.890669	4.570895
O	19.186338	5.928565	9.660573
O	17.397036	14.963167	13.642891
O	24.208883	10.996269	2.524208
O	26.094156	17.928654	9.597702
O	28.577553	13.534643	9.552158
O	21.705610	7.472410	13.685251
O	21.713104	15.292488	2.519263
O	14.878626	13.520060	9.574123
O	17.384623	17.881727	9.590279
O	26.015408	14.970229	13.633482
O	19.206772	11.018037	2.439296
O	24.201471	6.019061	9.574080
Al	20.094141	5.148306	5.523370
Si	11.507987	13.013627	0.509443
Si	5.852184	6.932468	3.060931
Si	14.568294	4.785968	12.114255
Si	9.938625	7.489449	12.098906
Si	16.133873	13.891063	3.054252

Si	7.492089	2.467171	5.562604
Si	18.547361	6.063942	0.426910
Si	17.059885	1.521803	3.046989
Si	14.595732	10.147855	12.130586
Si	9.019161	3.375107	0.544344
Si	11.472200	14.823144	5.547238
Si	20.153217	5.183493	8.590674
Si	17.683458	16.562984	13.622660
Si	23.247501	9.811542	1.985409
Si	25.722313	18.389254	11.102862
Si	28.850004	14.830235	8.605744
Si	20.165323	6.957079	13.667469
Si	23.238010	15.115897	1.990601
Si	14.592433	13.015613	11.089544
Si	16.158184	17.478964	8.602706
Si	27.198250	13.870049	13.544646
Si	18.586720	12.461635	1.992530
Si	24.789915	6.048373	11.083364
Si	23.231426	6.909950	13.640914
Si	14.614424	14.795990	8.598690
Si	28.833717	13.020798	11.065606
Si	20.172533	15.149117	2.041571
Si	24.823233	12.430488	2.045864
Si	18.595169	6.015467	11.155849
Si	27.269979	17.470842	8.570439
Si	16.196997	13.876302	13.598886
Si	17.669247	18.382439	11.105556
Si	20.178629	9.832955	1.914745
Si	25.690430	16.560408	13.609088
Si	23.243443	5.141106	8.588846
Si	14.601174	14.817490	5.551865
Si	17.090179	3.349626	0.541959
Si	11.467074	10.144037	12.094061
Si	9.035988	1.548826	3.076336
Si	5.885359	5.130135	5.535874
Si	14.576450	13.003013	0.505304
Si	11.495083	4.789600	12.135841
Si	20.153671	6.952280	3.022233
Si	18.505314	2.401110	5.577952
Si	7.499288	6.063032	0.498063
Si	16.123095	7.482652	12.136258
Si	9.948094	13.863821	3.070173
Rh	20.236246	8.143611	6.984108
Rh	21.444511	10.524422	7.213953
Rh	21.457455	9.361856	4.826460
C	20.002165	9.844856	6.098656
C	18.724449	10.501779	5.674776

CH₃C/H₈Rh₃

160

generated by VMD

H	21.693882	10.863276	4.153811
H	18.548294	8.252116	7.624354
H	19.091043	8.292986	8.248005
H	20.727943	10.786811	8.815214
H	20.603327	11.542108	8.374523
H	21.200916	8.845856	7.907419
H	18.887512	11.520911	5.169334
H	18.085457	10.665058	6.529956

H	18.175480	9.913723	4.907624
H	22.572130	10.094227	5.890834
H	21.508343	7.842995	5.870999
O	19.236990	16.799425	14.073554
O	19.940756	5.834561	7.115129
O	23.214329	8.605043	3.092048
O	15.519479	3.936378	11.105718
O	8.702915	7.109899	11.104947
O	17.369665	12.780404	3.010266
O	16.743216	17.417103	7.075734
O	26.524038	12.388658	13.871752
O	24.175301	16.031126	2.923075
O	14.889814	11.420382	11.148992
O	10.566443	3.198137	0.024009
O	11.175218	14.339725	7.079623
O	15.552185	3.103966	0.064861
O	14.925429	14.317525	7.069399
O	11.192595	11.428095	11.138083
O	19.258547	16.019735	3.047960
O	8.710473	12.764565	3.036454
O	17.357777	7.092964	11.123823
O	26.630970	17.261330	7.090436
O	16.862215	12.386387	13.953094
O	19.213318	18.912098	11.163018
O	20.211584	8.661154	3.062165
O	15.500849	11.769052	-0.014218
O	6.159316	5.664159	7.049359
O	19.984674	19.337992	13.686221
O	21.749170	4.618264	5.295247
O	21.679451	6.500007	2.609357
O	23.446510	19.298693	13.652564
O	26.762800	7.593919	13.638611
O	16.713955	15.339882	2.627191
O	14.947734	16.393286	5.380021
O	28.438990	10.529034	13.653506
O	26.727573	15.303946	2.605118
O	14.945511	10.538713	13.675848
O	16.666573	7.587587	13.656220
O	28.450342	16.365595	5.348503
O	19.752481	3.595185	8.576747
O	8.012956	12.280616	0.496219
O	6.467368	9.225589	0.554893
O	18.077490	4.551287	11.560723
O	13.062566	15.302176	8.712558
O	11.315050	0.678278	0.496265
O	14.710574	0.578576	0.414041
O	13.042691	13.314431	11.529896
O	6.288541	3.556340	8.697309
O	19.642715	9.215837	0.515551
O	18.060938	12.336706	0.450721
O	7.980619	4.572206	11.516999
O	11.105120	13.400262	2.021306
O	18.971888	3.870768	5.219860
O	6.919244	6.408183	1.953561
O	14.949627	6.374167	12.054608
O	11.107540	6.368098	12.023571
O	14.981220	13.444332	2.010558
O	6.977830	3.943794	5.179951
O	19.125092	6.491942	1.882864
O	17.330698	2.749474	2.034890
O	13.034607	9.710648	12.049999

O	8.842667	2.755119	2.024718
O	13.044117	14.561764	5.174620
O	21.711401	5.318022	9.052388
O	17.444525	17.141886	12.116347
O	21.729675	10.337226	1.631020
O	25.879107	17.130783	12.095278
O	27.912931	16.059095	9.079906
O	19.761421	6.515057	12.148501
O	23.666920	13.548559	2.067843
O	15.565472	13.828814	12.111042
O	15.580901	16.022747	9.034619
O	27.852757	13.850337	12.076826
O	19.742449	13.585098	2.057582
O	23.634993	6.528296	12.101890
O	13.044013	12.502234	0.472194
O	19.687428	6.498276	4.464035
O	6.261691	6.399217	4.515111
O	13.030547	4.591435	11.643937
O	10.546247	8.917461	11.593000
O	15.540468	13.903399	4.558886
O	8.728352	2.047614	4.571503
O	17.386271	4.944008	0.567328
O	17.288885	1.918751	4.583491
O	15.531500	8.919753	11.624606
O	8.686509	4.951788	0.592571
O	10.558869	13.865507	4.565027
O	19.216141	6.009518	9.623588
O	17.456606	14.938817	13.588409
O	24.173708	10.997693	2.523042
O	26.054230	17.894276	9.576828
O	28.579611	13.532948	9.560032
O	21.709866	7.479234	13.659481
O	21.716412	15.279814	2.494329
O	14.871408	13.525785	9.574451
O	17.387915	17.881359	9.580470
O	25.964926	14.952468	13.586123
O	19.249773	11.027822	2.441737
O	24.205112	6.025947	9.559134
Al	20.102032	5.132234	5.478176
Si	11.507806	13.020213	0.499429
Si	5.851645	6.942693	3.049646
Si	14.570008	4.795730	12.114568
Si	9.939976	7.494817	12.093578
Si	16.147692	13.871745	3.054604
Si	7.496033	2.458841	5.551137
Si	18.542511	6.074056	0.434091
Si	17.054007	1.501793	3.043132
Si	14.594823	10.149981	12.127833
Si	9.026753	3.368837	0.538296
Si	11.474478	14.795765	5.541206
Si	20.158363	5.176509	8.583533
Si	17.701183	16.545361	13.602325
Si	23.237389	9.805148	1.957195
Si	25.719845	18.387911	11.081031
Si	28.846073	14.818332	8.599493
Si	20.169195	6.966738	13.652191
Si	23.242184	15.110601	1.969085
Si	14.589784	13.023026	11.092576
Si	16.160872	17.478226	8.593613
Si	27.155085	13.854560	13.541636
Si	18.597029	12.446000	1.985726

Si	24.797421	6.055499	11.068110
Si	23.238060	6.920163	13.626601
Si	14.608646	14.798553	8.594649
Si	28.837173	13.028553	11.078032
Si	20.174776	15.148775	2.021392
Si	24.818283	12.408487	2.032480
Si	18.603302	6.033906	11.120983
Si	27.258739	17.463867	8.570704
Si	16.254705	13.851846	13.581208
Si	17.671986	18.385113	11.095888
Si	20.206942	9.839202	1.898897
Si	25.679825	16.549845	13.593109
Si	23.255501	5.144263	8.569185
Si	14.604945	14.805470	5.544750
Si	17.094175	3.344537	0.545108
Si	11.471393	10.148610	12.109233
Si	9.047177	1.534476	3.071146
Si	5.903797	5.137753	5.511461
Si	14.580289	13.012021	0.498614
Si	11.494307	4.796132	12.131523
Si	20.163443	6.979703	3.023939
Si	18.518129	2.388395	5.552776
Si	7.517414	6.067322	0.485699
Si	16.126347	7.490417	12.118968
Si	9.940829	13.841016	3.065245
Rh	20.161831	8.076155	6.829499
Rh	21.380592	10.485533	7.250966
Rh	21.493221	9.449934	4.842546
C	20.011232	9.879929	5.992574
C	18.717648	10.539749	5.636060

CH₂C/H₃Rh₃

154

generated by VMD

H	21.405874	8.112087	7.829257
H	21.411308	10.025064	9.039157
H	20.083488	11.675188	6.675353
H	19.217545	10.444833	7.763812
H	22.902214	9.656143	5.861113
O	19.244083	16.728439	14.083431
O	19.973732	5.703543	7.117472
O	23.293301	8.552968	3.078333
O	15.516992	3.869815	11.142540
O	8.712521	7.060574	11.137341
O	17.350151	12.753163	3.034214
O	16.738199	17.326540	7.096157
O	17.930962	7.377597	-0.130389
O	24.193037	15.934192	2.926672
O	14.872940	11.368612	11.147085
O	10.564137	3.127151	0.053722
O	11.181564	14.233354	7.099857
O	15.542203	3.061135	0.098178
O	14.915141	14.319934	7.084035
O	11.175395	11.386483	11.200686
O	10.584175	0.997598	3.027154
O	8.691397	12.764936	3.050236
O	17.355335	7.051341	11.133579
O	26.604137	17.288843	7.107506
O	16.832392	12.378631	13.995952

O	19.205666	18.899160	11.165033
O	20.189774	8.608111	3.092819
O	15.523334	11.741412	0.024183
O	6.115604	5.632760	7.066188
O	19.978395	19.270226	13.696310
O	21.777353	4.507324	5.281998
O	21.702673	6.475243	2.614961
O	23.434341	19.261513	13.677849
O	26.747583	7.540243	13.683455
O	16.709719	15.309395	2.630683
O	14.929353	16.378412	5.373925
O	28.455883	10.486800	13.722100
O	26.772371	15.282109	2.614065
O	14.953382	10.503229	13.678021
O	16.660175	7.551507	13.663582
O	28.419172	16.296955	5.419067
O	19.770826	3.518680	8.623111
O	8.036134	12.297710	0.494914
O	6.366663	9.211223	0.498055
O	18.070242	4.515808	11.586686
O	13.033035	15.257258	8.734879
O	11.315771	0.599750	0.486518
O	14.718258	0.521878	0.417048
O	13.039831	13.267845	11.551575
O	6.306398	3.528024	8.701460
O	19.724817	9.236407	0.535218
O	18.087467	12.306129	0.491776
O	7.964057	4.524407	11.515406
O	11.102999	13.332441	2.030403
O	18.958714	3.784871	5.142724
O	6.935557	6.324359	1.971293
O	14.951947	6.323295	12.064707
O	11.113226	6.332447	12.076498
O	14.961239	13.417685	2.037363
O	7.021566	3.916134	5.230459
O	19.134697	6.364823	2.001849
O	17.309040	2.715391	2.079013
O	13.026217	9.668286	12.086050
O	8.807574	2.740578	2.039660
O	13.034888	14.533570	5.188614
O	21.714682	5.259802	9.101932
O	17.462467	17.105665	12.120085
O	21.742115	10.344332	1.858593
O	25.902790	17.086773	12.136222
O	27.866953	15.983897	9.052095
O	19.762150	6.473842	12.149716
O	23.624374	13.471547	2.065388
O	15.572194	13.777122	12.089762
O	15.546795	15.992279	9.080680
O	27.856194	13.805898	12.128250
O	19.744358	13.549229	2.118912
O	23.638943	6.495670	12.117764
O	13.050066	12.442702	0.484091
O	19.812326	6.475354	4.571898
O	6.272177	6.339846	4.530503
O	13.028151	4.549040	11.660982
O	10.532304	8.881899	11.658622
O	15.533069	13.889190	4.577870
O	8.730163	1.999742	4.584120
O	17.389122	4.903461	0.604146
O	17.259287	1.829083	4.613994

O	15.516510	8.869591	11.630774
O	8.708001	4.920947	0.568513
O	10.562175	13.810990	4.575171
O	19.203260	5.942166	9.626987
O	17.402523	14.922116	13.622262
O	24.243023	10.933738	2.493606
O	26.056376	17.843075	9.613555
O	28.558460	13.482770	9.601555
O	21.705364	7.419756	13.683637
O	21.714312	15.253812	2.495594
O	14.844085	13.477105	9.569662
O	17.393927	17.832952	9.587225
O	25.998070	14.919409	13.657061
O	19.236994	10.993689	2.510493
O	24.207769	6.003777	9.569736
Al	20.122435	4.981588	5.479796
Si	11.511967	12.953759	0.508505
Si	5.881683	6.883987	3.063878
Si	14.568010	4.747655	12.135110
Si	9.936063	7.449590	12.141315
Si	16.134975	13.847647	3.073314
Si	7.502885	2.411093	5.569647
Si	18.565775	6.018998	0.520147
Si	17.056002	1.441622	3.059468
Si	14.589118	10.102889	12.135166
Si	9.022709	3.329114	0.544510
Si	11.466539	14.728304	5.571150
Si	20.167658	5.105688	8.621435
Si	17.702293	16.517916	13.609847
Si	23.266777	9.764069	1.952438
Si	25.724386	18.340322	11.117738
Si	28.825260	14.748137	8.614871
Si	20.165407	6.904993	13.659093
Si	23.234228	15.048033	1.968171
Si	14.578584	12.970438	11.087532
Si	16.158089	17.427509	8.612417
Si	27.197002	13.832110	13.608745
Si	18.593580	12.414806	2.037991
Si	24.797262	6.018563	11.082582
Si	23.236780	6.875292	13.644083
Si	14.584869	14.768519	8.613690
Si	28.828934	12.983284	11.118713
Si	20.169945	15.113015	2.027660
Si	24.826721	12.383110	2.027021
Si	18.598824	5.993888	11.126202
Si	27.246964	17.418715	8.591619
Si	16.214918	13.824443	13.576190
Si	17.672798	18.350954	11.098269
Si	20.201086	9.814466	1.969758
Si	25.703718	16.516996	13.638976
Si	23.253023	5.111233	8.592510
Si	14.593642	14.790133	5.556437
Si	17.082298	3.304247	0.583423
Si	11.465899	10.107765	12.168885
Si	9.036600	1.510269	3.072285
Si	5.912189	5.082926	5.529912
Si	14.580750	12.973336	0.523516
Si	11.493890	4.756385	12.150878
Si	20.199429	6.940124	3.078141
Si	18.487627	2.324224	5.566514
Si	7.524718	6.023080	0.490326

Si	16.123640	7.445467	12.124825
Si	9.952188	13.805592	3.072788
Rh	20.635897	7.671970	6.420136
Rh	21.916031	9.825164	7.558957
Rh	21.735514	9.301738	4.791115
C	19.998550	10.636604	7.022592
C	20.464569	9.589672	6.187531

Rh₄di- σ -C₂H₄/HRh₄

155

generated by VMD

H	24.404491	8.053844	6.810528
H	23.370960	10.534703	8.146757
H	24.407457	9.750217	6.102448
H	23.187117	8.795489	8.732466
H	20.745855	10.917800	6.517595
O	10.590150	11.775053	-0.070310
O	19.922956	5.734040	7.111930
O	6.269506	8.541540	2.960091
O	15.518980	3.933308	11.115111
O	8.721910	7.092044	11.113793
O	17.357176	12.852771	3.005208
O	16.726912	17.457260	7.093521
O	17.972666	7.443432	-0.121891
O	24.212345	16.006868	2.892242
O	14.853544	11.381942	11.078217
O	10.544701	3.217561	0.008288
O	11.214772	14.255804	7.093928
O	15.532554	3.125862	0.100306
O	14.917838	14.359302	7.076430
O	11.177794	11.433695	11.185002
O	19.252649	16.087059	3.040406
O	8.665267	12.855946	3.064832
O	17.341808	7.080348	11.150014
O	26.605654	17.347847	7.102924
O	8.050558	7.489093	0.095417
O	19.184738	18.946762	11.184869
O	19.850401	8.671284	3.099941
O	15.533487	11.779558	0.065252
O	6.136873	5.652580	7.079800
O	19.992098	19.317066	13.703474
O	21.774214	4.598084	5.250717
O	21.639761	6.713726	2.681465
O	23.433960	19.280752	13.655492
O	26.729273	7.578190	13.663186
O	16.702200	15.405436	2.608628
O	14.928649	16.450005	5.399335
O	28.466660	10.524851	13.697603
O	26.799355	15.352003	2.605028
O	14.921045	10.590619	13.629240
O	16.642588	7.583152	13.678884
O	28.421566	16.330477	5.433269
O	19.771572	3.569790	8.642652
O	8.045614	12.335171	0.516452
O	6.290468	9.451242	0.444152
O	18.078876	4.548014	11.580662
O	13.051241	15.302561	8.735135
O	11.318249	0.710098	0.497398
O	14.682852	0.598510	0.397253
O	13.057938	13.302047	11.544978
O	6.272984	3.569095	8.739477
O	19.743202	9.352921	0.516845
O	18.106197	12.358151	0.475270
O	7.939986	4.573438	11.530890
O	11.084192	13.361078	2.025277
O	18.989330	3.810823	5.127197

O	6.779364	6.110494	2.021875
O	14.931230	6.364716	12.073732
O	11.118152	6.378560	12.077498
O	14.954242	13.502179	2.032443
O	7.009636	3.992872	5.182528
O	19.140703	6.337404	1.986455
O	17.327658	2.787062	2.064097
O	13.018744	9.688435	12.046379
O	8.835180	2.830224	2.038042
O	13.049917	14.590196	5.170084
O	21.695049	5.340786	9.086780
O	17.435192	17.150019	12.130217
O	21.719538	10.252876	2.030029
O	25.868248	17.136969	12.138622
O	27.880726	16.026262	9.025168
O	19.761129	6.521938	12.142247
O	23.613955	13.553357	2.033910
O	15.600210	13.729355	12.121113
O	15.570580	16.041071	9.052045
O	27.877718	13.859828	12.122347
O	19.754324	13.641632	2.088829
O	23.638187	6.580221	12.106325
O	13.049682	12.480655	0.496360
O	19.668358	6.482959	4.560812
O	6.259770	6.469382	4.593577
O	13.019223	4.582128	11.648560
O	10.518285	8.926623	11.639259
O	15.555328	13.979920	4.566176
O	8.721852	2.075616	4.580922
O	17.382814	4.959913	0.545913
O	17.268101	1.878940	4.603392
O	15.518056	8.904700	11.635532
O	8.665708	4.984201	0.526899
O	10.573397	13.855920	4.567366
O	19.186104	6.001824	9.623643
O	17.395910	14.956328	13.625557
O	24.202709	11.035382	2.539595
O	26.059381	17.868452	9.613351
O	28.573368	13.530782	9.597308
O	21.695667	7.518407	13.650698
O	21.719492	15.347440	2.503619
O	14.876172	13.539485	9.579910
O	17.380085	17.897779	9.596552
O	26.004242	14.969767	13.646873
O	19.257069	11.102272	2.527242
O	24.194489	6.053858	9.572347
Al	20.115170	5.037333	5.486055
Si	11.509808	12.991416	0.506876
Si	5.867203	6.950382	3.071961
Si	14.559888	4.784703	12.120865
Si	9.935287	7.491062	12.127511
Si	16.136845	13.940080	3.054417
Si	7.496317	2.493830	5.563172
Si	18.577843	6.057793	0.495807
Si	17.075199	1.508836	3.042578
Si	14.577013	10.141272	12.098361
Si	9.008673	3.398159	0.528824
Si	11.481118	14.765421	5.566214
Si	20.145126	5.164289	8.611920
Si	17.694332	16.553453	13.617001
Si	23.283909	9.821293	1.993067

Si	25.719881	18.383678	11.108697
Si	28.844688	14.790160	8.605544
Si	20.157955	6.992595	13.642171
Si	23.230402	15.128719	1.952417
Si	14.595169	12.991677	11.080830
Si	16.149878	17.495762	8.614878
Si	27.220991	13.900472	13.603703
Si	18.605194	12.507402	2.019197
Si	24.792240	6.068860	11.083582
Si	23.221838	6.954835	13.630936
Si	14.602723	14.814157	8.608418
Si	28.844734	13.029203	11.113161
Si	20.177189	15.206981	2.031079
Si	24.809439	12.456169	2.036461
Si	18.592075	6.033594	11.127312
Si	27.253433	17.464552	8.586438
Si	16.162279	13.901102	13.631816
Si	17.652243	18.399252	11.115314
Si	20.152224	9.854267	2.001304
Si	25.703196	16.565905	13.643721
Si	23.235046	5.152714	8.608648
Si	14.603452	14.854097	5.554859
Si	17.079960	3.361490	0.564960
Si	11.464803	10.146332	12.142988
Si	9.038301	1.592912	3.068073
Si	5.905766	5.143715	5.539403
Si	14.578750	13.016375	0.529178
Si	11.490984	4.799897	12.155746
Si	20.085951	7.029915	3.102654
Si	18.495846	2.365787	5.563201
Si	7.438108	6.043336	0.537285
Si	16.109758	7.478914	12.137362
Si	9.949189	13.865706	3.069924
Rh	20.208742	7.805664	6.311099
Rh	20.397598	9.945921	5.190165
Rh	21.133718	9.632543	7.657554
Rh	22.367371	8.484186	5.364573
C	23.840406	8.989279	6.668768
C	23.139921	9.487565	7.864946

di- σ -C₂H₄/H₃Rh₄

157

generated by VMD

H	20.577824	8.544894	7.795378
H	21.318203	10.473185	4.721693
H	24.196823	7.935149	6.802286
H	23.511154	10.217644	8.667512
H	24.618010	9.704428	6.566815
H	22.985327	8.479038	8.832983
H	19.825365	10.703912	6.348443
O	19.243917	16.782488	14.114674
O	20.045834	5.836610	7.080891
O	6.140618	8.599633	3.238157
O	15.541039	3.947101	11.152588
O	8.722531	7.093756	11.100801
O	17.384287	12.812107	3.044413
O	16.802561	17.393110	7.117547
O	17.988932	7.495882	0.057191
O	24.201988	16.032303	2.895220

O	14.879708	11.450944	11.227314
O	10.578156	3.170515	0.077928
O	11.187390	14.366689	7.091987
O	15.547109	3.119389	0.050254
O	14.897815	14.295218	7.104443
O	11.206400	11.392319	11.062934
O	10.591446	1.042713	2.982235
O	8.699634	12.849070	3.070745
O	17.339933	7.104862	11.107656
O	26.606920	17.316797	7.086665
O	8.158640	7.404257	-0.161609
O	19.216305	18.914843	11.185151
O	19.844601	8.582012	2.925423
O	15.521771	11.797951	-0.019288
O	6.125445	5.615335	7.056053
O	19.989922	19.322001	13.704904
O	21.795891	4.440239	5.297885
O	21.754484	6.721419	2.535289
O	23.437199	19.325222	13.688009
O	26.756617	7.592407	13.642115
O	16.701307	15.354957	2.650881
O	14.997705	16.383387	5.431092
O	28.426418	10.594702	13.611047
O	26.777807	15.360670	2.590758
O	14.926926	10.516335	13.730037
O	16.686981	7.580075	13.655679
O	28.444010	16.407053	5.376065
O	19.732573	3.644682	8.556958
O	8.021762	12.276915	0.547151
O	6.458665	9.259591	0.658771
O	18.110987	4.583342	11.533659
O	13.059594	15.308819	8.754821
O	11.336098	0.638868	0.442983
O	14.733234	0.584756	0.388256
O	12.987977	13.316789	11.549218
O	6.302450	3.527618	8.707544
O	19.796333	9.441903	0.402692
O	18.074387	12.366023	0.486983
O	7.978603	4.569989	11.538535
O	11.112741	13.401773	2.042566
O	18.945364	3.896996	5.180203
O	6.979619	6.369073	1.996766
O	14.943866	6.389648	12.071045
O	11.119709	6.363477	12.053855
O	14.991523	13.439643	2.033438
O	7.060294	3.917657	5.218556
O	19.235287	6.151933	1.997274
O	17.323334	2.795552	2.032051
O	13.031520	9.707236	12.071210
O	8.794575	2.783128	2.045719
O	13.050127	14.613982	5.187259
O	21.724426	5.303926	9.093045
O	17.451925	17.152065	12.165785
O	21.752857	10.239767	1.956935
O	25.934177	17.163095	12.118947
O	27.914459	16.104372	9.063367
O	19.755714	6.570516	12.123976
O	23.643358	13.558818	2.060588
O	15.472061	13.881108	12.195057
O	15.592721	16.002825	9.052129
O	27.770067	13.731055	12.095745

O	19.769817	13.599928	2.082585
O	23.639584	6.547070	12.079765
O	13.057050	12.497087	0.494565
O	19.961334	6.512253	4.533163
O	6.234652	6.306130	4.525641
O	13.040041	4.586552	11.664675
O	10.548892	8.907692	11.601181
O	15.533223	13.900861	4.584596
O	8.782881	2.021061	4.596591
O	17.378002	4.966921	0.514278
O	17.279020	1.932372	4.575314
O	15.532664	8.938460	11.654352
O	8.711785	4.957182	0.561277
O	10.568705	13.916317	4.575593
O	19.225698	6.063939	9.591936
O	17.429335	14.942242	13.629071
O	24.198427	11.043281	2.625533
O	26.048000	17.912571	9.586253
O	28.532307	13.571157	9.576248
O	21.712530	7.479079	13.652184
O	21.726133	15.330621	2.464823
O	14.855352	13.533060	9.631913
O	17.393427	17.862379	9.623170
O	26.001791	14.980849	13.623132
O	19.252028	11.054505	2.489071
O	24.230724	6.002081	9.549368
Al	20.180346	5.029393	5.494368
Si	11.519192	13.009681	0.523456
Si	5.936532	6.954653	3.084839
Si	14.576193	4.809198	12.143027
Si	9.947051	7.485197	12.102046
Si	16.146772	13.882840	3.083467
Si	7.562705	2.427016	5.591274
Si	18.589876	6.046291	0.507882
Si	17.068718	1.531110	3.025529
Si	14.588042	10.154821	12.169930
Si	9.029493	3.366742	0.549571
Si	11.482517	14.837844	5.558822
Si	20.178953	5.219149	8.580060
Si	17.704308	16.543394	13.646271
Si	23.306581	9.797240	2.107611
Si	25.745129	18.412773	11.096532
Si	28.839262	14.847047	8.615444
Si	20.172644	6.963236	13.639395
Si	23.249264	15.129622	1.945616
Si	14.549295	13.044478	11.149537
Si	16.183228	17.454556	8.621527
Si	27.213634	13.903738	13.605762
Si	18.606434	12.479449	2.021172
Si	24.808908	6.050725	11.065114
Si	23.241817	6.930330	13.607100
Si	14.600904	14.788894	8.629975
Si	28.797369	13.003906	11.069592
Si	20.187675	15.165622	1.989373
Si	24.820032	12.444933	2.073994
Si	18.607925	6.077200	11.088893
Si	27.247698	17.506596	8.565881
Si	16.208891	13.875751	13.641323
Si	17.676664	18.383417	11.131146
Si	20.186598	9.843785	1.927024
Si	25.709301	16.578529	13.613122

Si	23.258850	5.112621	8.588814
Si	14.612986	14.804468	5.579932
Si	17.086260	3.364875	0.530216
Si	11.469716	10.150703	12.086864
Si	9.046046	1.548478	3.070216
Si	5.920717	5.045807	5.527347
Si	14.590118	13.023062	0.517418
Si	11.504578	4.790426	12.153962
Si	20.207638	6.967993	3.003220
Si	18.495863	2.413663	5.549600
Si	7.523759	6.055270	0.500932
Si	16.127958	7.501086	12.122757
Si	9.958303	13.891385	3.074185
Rh	20.562164	7.866850	6.179067
Rh	19.793489	9.855143	4.960341
Rh	21.306009	9.983165	7.383404
Rh	22.426540	9.222238	5.376032
C	23.852781	8.974343	6.892019
C	23.137018	9.318675	8.140952

di- σ -C₂H₄/H₅Rh₄

159

generated by VMD

H	21.952892	11.696615	7.415459
H	22.226860	7.701155	5.857790
H	20.867275	8.478602	7.781557
H	21.333328	10.440159	4.745059
H	24.133146	8.185511	7.213840
H	23.651487	10.710909	8.795068
H	24.643702	9.897967	6.740404
H	22.983400	9.046157	9.170192
H	19.891487	10.727887	6.434922
O	19.223274	16.780056	14.108372
O	20.006088	5.845325	7.088380
O	23.471617	8.577519	3.223020
O	15.533089	3.932147	11.137075
O	8.708585	7.084226	11.094499
O	17.365309	12.790283	3.028811
O	16.798300	17.356615	7.106767
O	17.960352	7.461096	-0.015738
O	15.518374	1.014829	2.889619
O	14.890233	11.434172	11.203870
O	10.568831	3.153164	0.077520
O	11.163080	14.357267	7.086122
O	15.545228	3.091302	0.051030
O	14.906332	14.281563	7.096179
O	11.178899	11.387424	11.064855
O	19.247705	16.045921	2.974472
O	8.700240	12.813574	3.059524
O	17.330778	7.081763	11.101554
O	26.603235	17.273092	7.085193
O	16.802921	12.389243	13.958459
O	19.206085	18.893858	11.180684
O	19.855070	8.585572	2.975860
O	24.169733	16.775719	14.116489
O	6.145076	5.634173	7.041974
O	19.985796	19.315142	13.696131
O	21.781340	4.461715	5.317934
O	21.732325	6.703244	2.552205

O	23.429230	19.301798	13.673279
O	26.756687	7.573875	13.631590
O	16.689390	15.336499	2.637697
O	14.980443	16.363388	5.419682
O	28.425030	10.561391	13.603166
O	26.756083	15.333700	2.589382
O	14.921234	10.496570	13.702718
O	16.675741	7.568402	13.644336
O	28.440224	16.387320	5.358366
O	19.724831	3.628721	8.533534
O	7.997590	12.263531	0.537922
O	6.440484	9.248052	0.641265
O	18.100346	4.562296	11.542822
O	13.053839	15.289861	8.731957
O	11.331571	0.620392	0.442049
O	14.718081	0.561013	0.388094
O	12.990448	13.288011	11.536339
O	6.310012	3.529189	8.677182
O	19.768232	9.386620	0.427761
O	18.073328	12.341524	0.479161
O	7.967908	4.557664	11.521111
O	11.108710	13.394362	2.034301
O	18.939281	3.879729	5.205291
O	6.952730	6.350964	1.965788
O	14.932501	6.371012	12.063395
O	11.110425	6.347073	12.032283
O	14.971158	13.428065	2.023556
O	7.041345	3.891848	5.225822
O	19.211435	6.190603	1.962263
O	17.329622	2.774921	2.024801
O	13.023698	9.703537	12.037247
O	8.777993	2.767503	2.035346
O	13.039898	14.583941	5.192183
O	21.720432	5.287326	9.061060
O	17.431250	17.139893	12.157516
O	21.738083	10.220780	1.960337
O	25.918015	17.143225	12.113187
O	27.917795	16.091173	9.072346
O	19.746103	6.553249	12.127335
O	23.640129	13.547372	2.074499
O	15.468946	13.867791	12.179062
O	15.574226	15.998384	9.051013
O	27.787588	13.751461	12.087008
O	19.756220	13.583569	2.082512
O	23.627993	6.526420	12.079279
O	13.043828	12.479019	0.479137
O	19.897650	6.488523	4.513783
O	6.258785	6.270894	4.494294
O	13.030801	4.568227	11.650695
O	10.542100	8.891669	11.583691
O	15.521830	13.881912	4.572555
O	8.765215	2.003490	4.583437
O	17.373013	4.943879	0.506085
O	17.275681	1.920720	4.569705
O	15.520280	8.915193	11.631070
O	8.702859	4.943699	0.547541
O	10.559695	13.892536	4.569315
O	19.222057	6.035198	9.602230
O	17.416840	14.931807	13.625307
O	24.184105	11.023120	2.618670
O	26.048903	17.900913	9.582129

O	28.533260	13.552754	9.565600
O	21.706039	7.463063	13.653125
O	21.715185	15.312065	2.468657
O	14.853735	13.519732	9.617669
O	17.387712	17.847712	9.611936
O	25.992678	14.962512	13.616643
O	19.244148	11.039047	2.494576
O	24.215488	6.004289	9.543402
Al	20.156361	5.039515	5.489181
Si	11.508510	13.000827	0.513746
Si	5.924769	6.934417	3.067248
Si	14.566655	4.789735	12.129956
Si	9.940118	7.470828	12.088684
Si	16.131605	13.865609	3.070022
Si	7.549323	2.401362	5.584709
Si	18.576292	6.032083	0.477800
Si	17.060110	1.516296	3.022170
Si	14.582899	10.138762	12.142477
Si	9.018004	3.352580	0.540548
Si	11.470823	14.817462	5.552210
Si	20.167631	5.201156	8.578938
Si	17.685465	16.534119	13.638873
Si	23.294058	9.776115	2.096055
Si	25.736181	18.394730	11.092382
Si	28.832022	14.831596	8.607399
Si	20.166134	6.947045	13.641750
Si	23.238937	15.115713	1.949500
Si	14.551628	13.026252	11.133161
Si	16.178650	17.440681	8.609131
Si	27.201149	13.883101	13.589816
Si	18.596594	12.459789	2.016207
Si	24.796181	6.040504	11.058842
Si	23.233475	6.908436	13.607969
Si	14.597248	14.776084	8.618743
Si	28.794933	12.994588	11.062469
Si	20.178110	15.148235	1.989466
Si	24.809250	12.425872	2.069965
Si	18.598700	6.054778	11.095939
Si	27.243645	17.484571	8.560967
Si	16.197880	13.863929	13.628737
Si	17.665274	18.368061	11.121213
Si	20.170631	9.821787	1.938135
Si	25.699902	16.559483	13.608620
Si	23.260782	5.112935	8.568326
Si	14.604508	14.782958	5.572764
Si	17.085960	3.342051	0.523109
Si	11.459449	10.136436	12.071910
Si	9.031525	1.532013	3.058081
Si	5.920641	5.038368	5.522779
Si	14.577228	13.004302	0.507270
Si	11.496285	4.774806	12.141833
Si	20.180563	6.958258	3.007296
Si	18.492249	2.391569	5.549531
Si	7.512428	6.039180	0.477711
Si	16.116564	7.482494	12.111877
Si	9.949172	13.868032	3.068041
Rh	20.603819	7.820428	6.313155
Rh	19.868233	9.821450	5.060528
Rh	21.405466	10.217661	7.389203
Rh	22.584423	9.313127	5.492432
C	23.866840	9.251592	7.193828

C	23.216446	9.788745	8.393964
---	-----------	----------	----------

di- σ -C₂H₄/H₇Rh₄

161

generated by VMD

H	19.653923	10.428877	6.603139
H	19.866446	9.125441	5.250012
H	22.064991	11.793879	7.305155
H	22.125198	7.807477	5.725342
H	20.856157	8.600080	7.617835
H	21.289492	10.553918	4.589162
H	24.193707	8.365956	6.786294
H	23.671604	10.714987	8.587682
H	24.625019	10.127388	6.437481
H	23.008018	9.019956	8.796064
H	20.776335	11.547909	6.112045
O	10.565166	11.748419	0.026760
O	19.888351	5.880831	7.087870
O	23.395628	8.538829	3.210016
O	24.216892	18.889744	11.217449
O	8.689370	7.057378	11.144246
O	17.395147	12.728498	3.133586
O	16.762770	17.352558	7.126407
O	18.030182	7.478209	0.181826
O	24.167097	16.006962	2.940232
O	14.850905	11.399904	11.243613
O	10.579000	3.095990	0.144614
O	11.149767	14.334488	7.118191
O	15.551026	3.047482	0.052034
O	14.890071	14.241729	7.122899
O	11.253097	11.326887	11.008365
O	19.237495	15.960197	3.003545
O	8.718208	12.759610	3.068873
O	17.345619	7.081519	11.132504
O	26.604240	17.304865	7.102302
O	16.837772	12.344845	13.954474
O	19.219456	18.858196	11.180363
O	19.920156	8.414496	2.716788
O	24.143703	16.749088	14.068969
O	6.251909	5.605114	7.064919
O	19.976824	19.270412	13.705769
O	21.785915	4.490859	5.417319
O	21.794212	6.525638	2.540021
O	23.411247	19.297045	13.735337
O	26.781967	7.563505	13.663035
O	16.689379	15.263521	2.674717
O	14.972812	16.315088	5.434665
O	28.379408	10.576180	13.556672
O	26.722902	15.302675	2.616679
O	14.933751	10.477094	13.751609
O	16.687614	7.520543	13.680678
O	28.434042	16.367016	5.393993
O	19.715567	3.657280	8.558922
O	7.987553	12.227444	0.546191
O	6.456917	9.187641	0.644786
O	18.110943	4.561992	11.558862
O	13.046983	15.262675	8.761366
O	11.326797	0.551829	0.468747
O	14.729782	0.515403	0.435571

O	12.977912	13.286602	11.563227
O	6.277874	3.503838	8.720962
O	19.705265	9.590579	0.361594
O	18.037632	12.157355	0.590271
O	7.985616	4.522007	11.558785
O	11.113532	13.397005	2.061120
O	18.971537	3.867645	5.191353
O	7.034149	6.354857	2.003603
O	14.952733	6.335961	12.085484
O	11.104056	6.307305	12.051095
O	15.021611	13.320137	2.048530
O	7.017286	3.845958	5.201655
O	19.276392	5.944028	1.985080
O	17.304935	2.749896	2.041911
O	13.026321	9.644182	12.106591
O	8.770814	2.704932	2.074309
O	13.021930	14.548009	5.220026
O	21.714680	5.326036	8.987656
O	17.459858	17.103638	12.174877
O	21.743189	10.223805	1.904819
O	25.999266	17.141333	12.174621
O	27.927137	16.105234	9.076678
O	19.754555	6.534349	12.168033
O	23.656372	13.506760	2.123435
O	15.480552	13.827342	12.189602
O	15.565971	15.967882	9.067229
O	27.747978	13.600251	12.130318
O	19.749510	13.498271	2.090442
O	23.609056	6.456331	12.116892
O	13.041039	12.452952	0.522194
O	19.947500	6.488652	4.492467
O	6.290288	6.261425	4.526798
O	13.042194	4.540587	11.682833
O	10.551792	8.848199	11.579021
O	15.499545	13.822404	4.606665
O	8.759820	1.943606	4.616956
O	17.346289	4.926482	0.495457
O	17.278276	1.917227	4.591759
O	15.528082	8.892658	11.684723
O	8.718069	4.893779	0.580802
O	10.539447	13.876588	4.597862
O	19.244457	6.062054	9.635174
O	17.428402	14.896295	13.636786
O	24.193523	10.968984	2.619550
O	26.054508	17.883703	9.621278
O	28.501879	13.560704	9.607727
O	21.708612	7.407682	13.714488
O	21.705395	15.233315	2.499177
O	14.840810	13.484037	9.641453
O	17.370207	17.821136	9.630772
O	25.907925	14.876517	13.551686
O	19.286499	10.957530	2.650355
O	24.209650	5.965985	9.587198
Al	20.150141	5.061856	5.516772
Si	11.505346	12.974894	0.545802
Si	5.948566	6.877715	3.080975
Si	14.574194	4.759453	12.178106
Si	9.942115	7.439817	12.113122
Si	16.141621	13.793918	3.119996
Si	7.530703	2.366727	5.597079
Si	18.586119	5.977620	0.516652

Si	17.041931	1.498322	3.051411
Si	14.578375	10.106492	12.196573
Si	9.023422	3.300886	0.584779
Si	11.454631	14.795480	5.583706
Si	20.143406	5.238742	8.561065
Si	17.691452	16.499769	13.660172
Si	23.285652	9.741728	2.077870
Si	25.762459	18.373419	11.137607
Si	28.820333	14.824380	8.635324
Si	20.169220	6.894928	13.689392
Si	23.239780	15.070574	1.995170
Si	14.536291	12.996516	11.159363
Si	16.151880	17.421589	8.633817
Si	27.177435	13.863475	13.619354
Si	18.597103	12.364614	2.095600
Si	24.790779	5.997452	11.099257
Si	23.234650	6.854259	13.645116
Si	14.586647	14.743670	8.644571
Si	28.793236	12.945757	11.076154
Si	20.170536	15.069861	2.012841
Si	24.818935	12.379736	2.086985
Si	18.613447	6.054174	11.120806
Si	27.247845	17.502178	8.579833
Si	16.219938	13.817238	13.633542
Si	17.675648	18.334454	11.137136
Si	20.187273	9.773003	1.901055
Si	25.683153	16.484482	13.621824
Si	23.269407	5.098639	8.577888
Si	14.586871	14.739818	5.599304
Si	17.082857	3.318657	0.536861
Si	11.466584	10.097476	12.060314
Si	9.026753	1.466318	3.092964
Si	5.945672	5.029501	5.554931
Si	14.577661	12.966170	0.527919
Si	11.499775	4.737392	12.155406
Si	20.235760	6.832987	2.948094
Si	18.500608	2.394641	5.564780
Si	7.546081	6.009206	0.505957
Si	16.128325	7.456139	12.146970
Si	9.940773	13.845444	3.092089
Rh	20.548096	7.863737	6.200932
Rh	19.710426	10.789335	4.971725
Rh	21.359058	10.382846	7.236925
Rh	22.485420	9.420359	5.260199
C	23.883478	9.420938	6.850847
C	23.243267	9.834768	8.097542

di- σ -C₂H₄/H₉Rh₄

163

generated by VMD

H	20.049915	10.376901	8.356338
H	22.708925	10.528749	5.970356
H	19.006565	9.038852	5.761968
H	21.395712	11.606920	8.125902
H	21.778694	8.173209	6.021931
H	21.564539	9.600149	4.916830
H	23.944187	7.970439	7.568777
H	22.965412	10.122023	9.354575
H	24.495932	9.724044	7.567399

H	22.189079	8.498941	9.130915
H	21.984863	11.675823	7.430898
H	20.176355	8.715295	7.734576
H	20.030785	11.007629	6.103498
O	19.259171	16.779184	14.093206
O	20.058153	5.824581	7.093202
O	23.543011	8.592066	3.129213
O	15.560630	3.943336	11.121681
O	8.739084	7.088593	11.089907
O	17.398663	12.822628	3.015180
O	16.788757	17.431986	7.077533
O	18.038269	7.497297	0.013210
O	15.554951	1.023056	2.882842
O	14.898054	11.430683	11.151437
O	10.590176	3.200772	0.034642
O	11.218177	14.355820	7.063117
O	15.572193	3.124799	0.021206
O	14.918511	14.325534	7.062757
O	11.223660	11.393478	11.041766
O	10.610012	1.065371	2.990158
O	8.718813	12.858769	3.026578
O	17.360067	7.094395	11.096839
O	26.628574	17.313854	7.076273
O	16.794203	12.428042	14.028535
O	19.234474	18.921925	11.144831
O	19.823233	8.591401	2.870538
O	24.200268	16.788914	14.117588
O	6.139050	5.631156	7.054533
O	20.011572	19.312891	13.666842
O	21.805882	4.568262	5.218826
O	21.726776	6.722641	2.624217
O	23.453180	19.312027	13.655240
O	26.783646	7.582913	13.627210
O	16.732021	15.370095	2.607824
O	14.981647	16.423380	5.394741
O	28.467621	10.583699	13.585183
O	26.800049	15.375563	2.572360
O	14.932343	10.536713	13.668327
O	16.696068	7.579413	13.637601
O	28.461205	16.401859	5.359548
O	19.775932	3.620989	8.549777
O	8.041791	12.321590	0.493407
O	6.401368	9.312258	0.556041
O	18.123343	4.575932	11.549636
O	13.082204	15.319583	8.725216
O	11.357075	0.681402	0.448940
O	14.733028	0.602001	0.381294
O	13.027513	13.305970	11.517439
O	6.301072	3.529659	8.693594
O	19.810200	9.490551	0.359230
O	18.109646	12.333538	0.473088
O	7.997090	4.562806	11.525208
O	11.132457	13.416691	2.010213
O	18.984457	3.894567	5.184375
O	6.917433	6.273861	1.981172
O	14.959013	6.383171	12.050078
O	11.143963	6.363286	12.027887
O	15.005967	13.459286	2.009358
O	7.049649	3.965055	5.176370
O	19.250248	6.147320	1.961608
O	17.337383	2.809906	2.012368

O	13.051084	9.694540	12.015210
O	8.826603	2.802222	2.016215
O	13.067011	14.617388	5.145942
O	21.741552	5.312906	9.099009
O	17.487612	17.139906	12.120040
O	21.763208	10.245768	1.972445
O	25.941359	17.157858	12.108604
O	27.929373	16.084431	9.042316
O	19.777653	6.563101	12.114856
O	23.656515	13.569448	2.037537
O	15.533434	13.841318	12.133077
O	15.617449	16.010057	9.021781
O	27.810524	13.747968	12.058804
O	19.776709	13.630101	2.060091
O	23.653248	6.537221	12.066412
O	13.074784	12.491485	0.475810
O	19.811852	6.534430	4.522553
O	6.290065	6.426514	4.559361
O	13.059639	4.581987	11.627990
O	10.560361	8.905990	11.578071
O	15.562219	13.943324	4.552217
O	8.766374	2.054696	4.561604
O	17.405577	4.969001	0.465765
O	17.303293	1.948237	4.558173
O	15.554467	8.928372	11.621581
O	8.707788	4.966928	0.523709
O	10.584603	13.913416	4.546304
O	19.233385	6.031131	9.593279
O	17.426327	14.954107	13.617076
O	24.233358	11.046165	2.548354
O	26.086250	17.912682	9.580043
O	28.574516	13.558091	9.542491
O	21.731812	7.504460	13.626072
O	21.744181	15.341093	2.470379
O	14.876468	13.532946	9.580439
O	17.406567	17.880104	9.584199
O	26.008663	14.966798	13.586857
O	19.314266	11.086848	2.495918
O	24.255285	5.998214	9.537292
Al	20.170959	5.084219	5.475581
Si	11.537278	13.007712	0.495514
Si	5.933984	6.958539	3.065211
Si	14.593781	4.802083	12.112453
Si	9.968151	7.481265	12.084431
Si	16.168642	13.903800	3.050421
Si	7.546644	2.469104	5.552009
Si	18.622940	6.042835	0.470291
Si	17.090445	1.545325	3.009456
Si	14.605698	10.148795	12.112591
Si	9.042701	3.380389	0.516276
Si	11.500652	14.832947	5.529395
Si	20.197447	5.202196	8.583815
Si	17.720369	16.552473	13.612957
Si	23.324041	9.811146	2.043138
Si	25.765320	18.408949	11.086832
Si	28.866760	14.840123	8.585819
Si	20.192263	6.987884	13.621291
Si	23.263935	15.142154	1.937596
Si	14.583188	13.027961	11.094251
Si	16.190767	17.468151	8.590803
Si	27.240046	13.912289	13.564077

Si	18.631010	12.493468	2.005564
Si	24.826715	6.045245	11.055729
Si	23.256115	6.940478	13.588868
Si	14.623210	14.799832	8.593154
Si	28.833136	13.001787	11.040151
Si	20.205389	15.194571	1.989778
Si	24.840921	12.462746	2.024891
Si	18.624189	6.064436	11.089727
Si	27.276625	17.496460	8.553430
Si	16.206444	13.886555	13.608095
Si	17.697035	18.383993	11.097151
Si	20.198902	9.851061	1.889439
Si	25.725927	16.566778	13.600429
Si	23.270126	5.116754	8.584797
Si	14.625183	14.835021	5.541248
Si	17.110519	3.368214	0.504207
Si	11.491961	10.144465	12.055361
Si	9.061597	1.570289	3.045528
Si	5.938422	5.115856	5.509500
Si	14.606486	13.021222	0.498416
Si	11.525537	4.788468	12.118771
Si	20.157253	6.976995	3.017374
Si	18.520849	2.416152	5.539888
Si	7.504997	6.048651	0.482851
Si	16.143658	7.493732	12.102019
Si	9.976970	13.900787	3.043169
Rh	20.128057	7.895661	6.314782
Rh	19.949419	10.026044	4.805456
Rh	21.211052	10.168907	7.313686
Rh	23.124416	9.060865	5.547998
C	23.637442	9.030886	7.583333
C	22.646242	9.362284	8.631179

$\pi\text{-C}_2\text{H}_4/\text{HRh}_4$

155

generated by VMD

H	23.161686	8.119126	9.185992
H	20.652807	9.691018	10.194301
H	23.117620	9.884428	9.703207
H	20.684759	7.920410	9.662008
H	21.687206	10.740422	6.256775
O	10.558760	11.819602	-0.081304
O	19.770744	5.759437	7.136787
O	6.133234	8.560298	2.870271
O	15.471764	3.962493	11.093711
O	8.663138	7.157332	11.142449
O	17.305849	12.885403	2.991791
O	16.706148	17.456009	7.081977
O	17.933949	7.480436	-0.122343
O	15.505055	1.000862	2.936042
O	14.784672	11.417247	11.058645
O	10.508758	3.245034	-0.007667
O	11.162345	14.284142	7.090498
O	15.506827	3.179875	0.077695
O	14.904730	14.433996	7.073520
O	11.171821	11.482603	11.217141
O	10.549431	1.101959	3.051260
O	8.646312	12.887793	3.038970
O	17.332172	7.134337	11.170545

O	26.614325	17.444567	7.100116
O	8.022043	7.548110	0.114971
O	10.483579	3.973485	11.153070
O	20.007799	8.708839	3.105419
O	15.501065	11.824351	0.068723
O	6.167233	5.822454	7.068119
O	19.948872	19.359869	13.677349
O	21.740919	4.650034	5.355763
O	21.622568	6.628045	2.702565
O	23.402943	19.323496	13.634692
O	26.711855	7.625170	13.686191
O	16.672421	15.448170	2.601319
O	14.884470	16.504765	5.374982
O	28.437634	10.569119	13.730822
O	26.764189	15.397785	2.614270
O	14.908005	10.653815	13.619485
O	16.590681	7.631011	13.684820
O	28.393330	16.367485	5.434829
O	19.789860	3.586202	8.684969
O	8.015407	12.389531	0.486314
O	6.242059	9.515829	0.382287
O	18.014067	4.587631	11.617174
O	13.002736	15.335956	8.720165
O	11.284473	0.739729	0.515987
O	14.669767	0.653543	0.428022
O	13.036698	13.375231	11.542697
O	6.214767	3.636546	8.604682
O	19.715147	9.365650	0.532361
O	18.072899	12.408987	0.464711
O	7.927114	4.623642	11.582591
O	11.057464	13.421719	2.005731
O	18.993763	3.857149	5.078479
O	6.786318	6.120947	2.027174
O	14.909701	6.404116	12.049538
O	11.068464	6.424455	12.059790
O	14.910269	13.563095	2.019213
O	6.978667	4.049256	5.226385
O	19.094318	6.419429	2.013832
O	17.258520	2.819165	2.073869
O	12.987203	9.717036	12.083247
O	8.814923	2.874076	2.029943
O	13.015710	14.624934	5.185746
O	21.665657	5.432263	9.015768
O	17.418346	17.180353	12.101131
O	21.695387	10.395947	1.974074
O	25.819204	17.164333	12.129454
O	27.829693	16.051985	9.020449
O	19.745327	6.527943	12.159525
O	23.586123	13.576748	2.029859
O	15.602779	13.738074	12.095578
O	15.497249	16.118547	9.065907
O	27.850698	13.907072	12.132223
O	19.713093	13.665153	2.105652
O	23.580969	6.598135	12.117298
O	13.015536	12.531649	0.475780
O	19.676865	6.572643	4.592044
O	6.217274	6.527421	4.579766
O	12.981820	4.640056	11.630583
O	10.479780	8.982778	11.661235
O	15.516909	14.031191	4.556679
O	8.679950	2.136849	4.563947

O	17.356421	5.002445	0.578968
O	17.242735	1.933870	4.616013
O	15.486980	8.951138	11.632570
O	8.656553	5.030165	0.502535
O	10.546685	13.893127	4.555174
O	19.158304	6.004785	9.659832
O	17.368196	15.000549	13.608742
O	24.203968	11.046622	2.496812
O	26.046530	17.927399	9.613005
O	28.538979	13.563010	9.604272
O	21.663313	7.552510	13.677166
O	21.686375	15.362566	2.516251
O	14.845795	13.591950	9.567994
O	17.292093	17.996622	9.586953
O	25.978210	15.012267	13.657626
O	19.193663	11.115959	2.513067
O	24.185665	6.044544	9.593657
Al	20.070126	5.109471	5.514181
Si	11.475805	13.040847	0.488293
Si	5.837609	6.970561	3.033760
Si	14.524948	4.827128	12.100779
Si	9.894619	7.544614	12.141716
Si	16.097816	13.984446	3.043735
Si	7.461199	2.532830	5.558257
Si	18.543615	6.107974	0.521502
Si	17.032761	1.544083	3.061775
Si	14.542321	10.184951	12.098606
Si	8.978391	3.438494	0.518367
Si	11.442912	14.800294	5.566167
Si	20.098749	5.193148	8.614110
Si	17.666159	16.597178	13.596813
Si	23.238081	9.872422	1.936642
Si	25.675976	18.419582	11.108772
Si	28.797392	14.817366	8.601928
Si	20.130718	7.016745	13.655993
Si	23.201797	15.153919	1.972393
Si	14.564399	13.033527	11.066256
Si	16.094036	17.552305	8.587057
Si	27.190599	13.937969	13.613128
Si	18.561399	12.532781	2.016832
Si	24.757370	6.104869	11.115149
Si	23.190128	6.996000	13.644196
Si	14.560618	14.870536	8.604430
Si	28.822136	13.079845	11.125357
Si	20.142393	15.228286	2.046839
Si	24.788399	12.485328	2.014062
Si	18.558907	6.058771	11.157815
Si	27.243399	17.510719	8.593510
Si	16.134977	13.945124	13.612358
Si	17.616556	18.450853	11.110474
Si	20.145151	9.911132	1.996665
Si	25.669220	16.607058	13.642577
Si	23.211512	5.230499	8.578575
Si	14.569736	14.906514	5.548707
Si	17.045546	3.405063	0.575796
Si	11.437090	10.191608	12.175192
Si	9.008498	1.634624	3.059891
Si	5.878505	5.205299	5.549198
Si	14.544639	13.065694	0.516819
Si	11.451018	4.847543	12.132235
Si	20.097786	7.059654	3.112235

Si	18.486841	2.426641	5.552907
Si	7.428358	6.088151	0.531099
Si	16.079584	7.525135	12.135648
Si	9.921068	13.907743	3.058080
Rh	20.278036	7.843416	6.356398
Rh	21.152662	9.736212	5.077204
Rh	21.475323	9.609923	7.664930
Rh	22.685999	8.052588	6.143456
C	22.550545	9.001131	9.379955
C	21.175217	8.893914	9.649100

$\pi\text{-C}_2\text{H}_4/\text{H}_3\text{Rh}_4$

157

generated by VMD

H	22.465284	8.419412	7.966411
H	20.988050	10.671921	6.382250
H	21.461716	9.794518	10.498048
H	19.802135	8.586906	7.578303
H	20.233065	8.467200	10.150623
H	18.724491	10.168957	9.034292
H	19.975780	11.483655	9.359446
O	19.102077	16.735638	13.964346
O	19.680235	5.734076	6.957248
O	6.108421	8.534457	2.950805
O	15.401272	3.903190	11.013053
O	8.592439	7.057168	10.989351
O	17.247181	12.822750	2.901257
O	16.648920	17.335402	6.973155
O	17.952961	7.487314	-0.016456
O	15.408538	0.980983	2.782843
O	14.745754	11.392046	11.010796
O	10.431377	3.150145	-0.074479
O	11.052022	14.261269	6.948279
O	24.061449	8.118953	14.076118
O	14.783463	14.337619	6.958640
O	11.051403	11.364604	10.959146
O	10.440862	1.029220	2.859026
O	8.547965	12.843887	2.923492
O	17.212254	7.060512	11.003337
O	26.501438	17.414265	6.939932
O	16.604124	12.438799	13.964135
O	10.385014	3.904211	11.031403
O	19.678986	8.522466	2.739150
O	24.053013	16.753513	14.011384
O	6.103643	5.728866	6.922553
O	19.860296	19.266710	13.552467
O	21.675983	4.489438	5.281641
O	21.614731	6.679920	2.457414
O	23.282942	19.270672	13.541577
O	26.608423	7.557581	13.531790
O	16.548983	15.364086	2.487828
O	14.822828	16.401628	5.259167
O	28.330240	10.546129	13.507391
O	26.657873	15.348148	2.446815
O	14.792348	10.520185	13.538174
O	16.528282	7.550065	13.535834
O	28.312920	16.352110	5.297206
O	19.638603	3.584282	8.531649
O	7.898169	12.327604	0.382678

O	6.165404	9.346147	0.395614
O	17.967825	4.531106	11.420570
O	12.891454	15.261946	8.607911
O	11.220192	0.630344	0.337847
O	14.578537	0.587932	0.284812
O	12.873666	13.266358	11.381335
O	6.161839	3.570423	8.474732
O	19.726450	9.493836	0.269235
O	17.950747	12.351947	0.360511
O	7.811882	4.542680	11.425816
O	10.965321	13.363715	1.890218
O	18.888119	3.833862	4.918536
O	6.796771	6.172885	1.878514
O	14.804820	6.343909	11.939383
O	10.990406	6.340787	11.948959
O	14.843223	13.430839	1.898710
O	6.932779	3.928151	5.120469
O	19.121237	6.048590	1.910583
O	17.178671	2.786474	1.920142
O	12.897024	9.672900	11.906239
O	8.667415	2.797611	1.907700
O	12.914103	14.575427	5.051219
O	21.572592	5.342090	8.843880
O	17.323599	17.121994	12.004401
O	21.599932	10.225389	2.012065
O	25.784275	17.113892	11.998536
O	27.733467	16.036726	8.867059
O	19.630247	6.510471	12.012816
O	23.486206	13.537124	1.925040
O	15.377778	13.795859	12.009028
O	15.385729	16.039703	8.940632
O	27.674784	13.719879	11.989299
O	19.642927	13.583040	1.964748
O	23.502323	6.543246	11.979579
O	12.919648	12.443468	0.367839
O	19.817831	6.528625	4.435658
O	6.122959	6.343733	4.412182
O	12.896148	4.555654	11.508042
O	10.403680	8.880480	11.494655
O	15.409179	13.920768	4.440526
O	8.622808	2.021400	4.445640
O	17.260645	4.953803	0.376502
O	17.161613	1.888490	4.455563
O	15.395375	8.889641	11.504496
O	8.578352	4.949565	0.361651
O	10.435207	13.882689	4.422151
O	19.092968	6.029798	9.495203
O	17.230394	14.944651	13.511697
O	24.088821	11.013726	2.419834
O	25.913483	17.862875	9.463599
O	28.372707	13.527362	9.453197
O	21.571733	7.484869	13.528328
O	21.588545	15.320702	2.374745
O	14.733534	13.519916	9.459610
O	17.216036	17.881798	9.475299
O	25.898642	14.947932	13.525988
O	19.110956	11.040270	2.382782
O	24.073910	6.002536	9.454985
Al	20.023502	5.024417	5.371324
Si	11.381621	12.958648	0.378114
Si	5.814527	6.924531	2.922157

Si	14.431940	4.763519	11.999936
Si	9.811469	7.455979	11.996325
Si	16.009472	13.886730	2.932559
Si	7.410225	2.412082	5.448617
Si	18.498018	6.008245	0.408686
Si	16.942652	1.507536	2.901044
Si	14.454326	10.120243	11.989092
Si	8.887179	3.356835	0.398704
Si	11.344233	14.778371	5.428983
Si	19.996786	5.180268	8.445859
Si	17.554523	16.534782	13.499182
Si	23.163128	9.779478	1.928209
Si	25.603872	18.361198	10.973072
Si	28.677071	14.780479	8.464436
Si	20.040945	6.943039	13.519177
Si	23.105595	15.114010	1.837490
Si	14.429252	12.991472	10.964576
Si	16.017212	17.459864	8.468534
Si	27.140854	13.901059	13.507724
Si	18.479704	12.456985	1.900276
Si	24.663862	6.035155	10.968310
Si	23.099569	6.933164	13.504344
Si	14.446721	14.791101	8.486798
Si	28.666096	12.971574	10.945538
Si	20.053921	15.149366	1.882843
Si	24.681208	12.440690	1.911029
Si	18.471809	6.023833	10.987459
Si	27.119415	17.483274	8.439072
Si	16.007130	13.880680	13.499863
Si	17.520882	18.373537	10.990695
Si	20.031359	9.823359	1.837557
Si	25.586514	16.543053	13.504122
Si	23.126781	5.156929	8.446802
Si	14.472656	14.811940	5.428508
Si	16.950954	3.355292	0.415984
Si	11.336830	10.118407	11.970217
Si	8.899091	1.547973	2.920076
Si	5.813888	5.067802	5.408066
Si	14.450584	12.979962	0.389315
Si	11.365179	4.762755	12.011465
Si	20.059006	6.949356	2.885395
Si	18.391802	2.397627	5.398919
Si	7.361525	6.019341	0.365000
Si	15.984953	7.458364	11.997648
Si	9.819650	13.868697	2.923101
Rh	20.272272	7.811615	6.125035
Rh	21.118002	9.582286	7.825890
Rh	22.715424	7.881808	6.430576
Rh	21.592888	9.693340	5.205727
C	19.765654	10.411667	9.262737
C	20.608694	9.461000	9.895863

π -C₂H₄/H₅Rh₄

159

generated by VMD

H	20.124973	8.131064	7.993299
H	22.582869	9.389309	5.422695
H	22.615038	8.611630	7.773522
H	21.231592	10.591725	6.633820

H	20.278862	9.933836	10.725033
H	21.930784	9.078492	9.445816
H	18.952967	10.218857	9.479479
H	20.319202	12.083503	8.471045
H	21.675032	11.744156	9.678960
O	19.122240	16.710661	13.901462
O	19.655642	5.507970	6.980597
O	6.051507	8.439801	2.811424
O	24.032860	18.819899	11.024150
O	8.590668	7.047560	10.991131
O	17.205999	12.752034	2.918654
O	16.657600	17.254295	6.958277
O	26.485704	12.356205	13.876170
O	24.079996	15.891581	2.777168
O	14.700547	11.328250	10.899098
O	19.069324	8.084970	14.022914
O	11.113018	14.082458	6.970811
O	24.044443	8.053934	14.125702
O	14.763197	14.389634	6.964891
O	28.375410	11.387730	11.121758
O	10.460471	1.038105	2.864455
O	25.862696	12.785285	2.940941
O	17.236530	7.040335	10.991765
O	26.463577	17.424829	6.970454
O	16.632278	12.431440	14.064814
O	19.040665	18.910030	11.048851
O	19.879364	8.573927	3.039999
O	24.062521	16.742907	14.068877
O	23.334337	5.811399	6.897854
O	19.848475	19.259447	13.574491
O	21.676289	4.413796	5.264894
O	21.537554	6.561628	2.449317
O	23.289303	19.254089	13.550772
O	26.582876	7.508962	13.550797
O	16.590021	15.314540	2.498429
O	14.806878	16.415129	5.219025
O	28.340233	10.443492	13.621243
O	26.679794	15.281230	2.503076
O	14.851341	10.542784	13.446542
O	16.496059	7.538277	13.506605
O	28.232134	16.211725	5.401440
O	19.681978	3.413087	8.611102
O	7.930706	12.279825	0.386837
O	6.164330	9.355794	0.300350
O	17.898436	4.497782	11.478066
O	12.849656	15.251674	8.629719
O	11.190160	0.567913	0.343037
O	14.578243	0.512575	0.271380
O	12.927280	13.255213	11.418970
O	6.236048	3.625044	8.391062
O	19.578838	9.254702	0.473261
O	17.984356	12.261064	0.400112
O	7.785378	4.530008	11.362207
O	10.936648	13.278752	1.886806
O	18.904293	3.681593	4.873138
O	6.723158	6.035910	1.844276
O	14.827387	6.283494	11.891241
O	10.982699	6.328816	11.960313
O	14.820308	13.440118	1.921993
O	6.954131	3.948579	5.195389
O	18.976799	6.311318	1.886957

O	17.174208	2.699809	1.956117
O	12.891292	9.643867	11.940954
O	8.652198	2.753676	1.875037
O	12.909628	14.557501	5.039049
O	21.565001	5.255612	8.871438
O	17.291496	17.114918	11.990993
O	21.599493	10.232966	1.890757
O	25.782396	17.062813	12.042813
O	27.637924	15.888845	8.809667
O	19.638769	6.428507	12.004113
O	23.468033	13.447365	1.900042
O	15.479234	13.652022	11.975643
O	15.325244	16.085135	8.960757
O	27.769024	13.826839	12.050609
O	19.600447	13.560326	2.025773
O	23.504162	6.526281	11.985408
O	12.920244	12.432045	0.366807
O	19.716602	6.372931	4.427435
O	6.062053	6.320477	4.380396
O	12.881338	4.527349	11.528321
O	10.389308	8.875659	11.544711
O	15.414257	13.920621	4.462715
O	8.610382	2.039279	4.421731
O	17.247786	4.884355	0.454624
O	17.108301	1.789926	4.499188
O	15.369978	8.838106	11.447825
O	8.592219	4.916090	0.345454
O	10.454165	13.756805	4.435254
O	19.058680	5.867978	9.502199
O	17.259544	14.910480	13.467969
O	24.103371	10.925611	2.387565
O	25.921432	17.791327	9.509665
O	28.403868	13.455094	9.507250
O	21.560667	7.412727	13.546112
O	21.586620	15.256786	2.359207
O	14.731085	13.535623	9.448418
O	17.238592	17.854628	9.452854
O	25.860092	14.894578	13.557291
O	19.128101	11.008018	2.470636
O	24.044344	6.050895	9.436347
Al	20.004471	4.900317	5.337182
Si	11.375510	12.928081	0.368302
Si	5.748356	6.839257	2.859721
Si	14.425393	4.713888	11.998601
Si	9.797847	7.439537	12.017114
Si	16.003935	13.859504	2.952161
Si	7.406526	2.406088	5.443912
Si	18.437021	5.989482	0.396181
Si	16.932798	1.419509	2.934007
Si	14.452880	10.087975	11.931323
Si	8.875605	3.317771	0.369314
Si	11.338719	14.657778	5.458953
Si	19.996952	5.014736	8.492368
Si	17.564825	16.504206	13.470698
Si	23.147640	9.732028	1.848183
Si	25.580315	18.298969	11.008313
Si	28.665377	14.679691	8.473231
Si	20.029879	6.871707	13.512552
Si	23.100840	15.027905	1.820758
Si	14.456497	12.943126	10.934914
Si	16.030218	17.457045	8.447210

Si	27.083481	13.829895	13.522096
Si	18.469976	12.405189	1.949385
Si	24.651518	6.039044	10.948349
Si	23.094704	6.876132	13.517289
Si	14.415677	14.817208	8.497859
Si	28.704500	12.979364	11.026221
Si	20.041811	15.114929	1.895605
Si	24.680532	12.366106	1.904393
Si	18.457331	5.956717	10.996899
Si	27.098766	17.384478	8.464248
Si	16.044733	13.836416	13.482398
Si	17.509941	18.359634	10.972535
Si	20.042171	9.775173	1.939241
Si	25.583157	16.495375	13.546742
Si	23.116337	5.185269	8.427193
Si	14.460738	14.825959	5.423782
Si	16.936907	3.287656	0.460611
Si	11.335196	10.091052	12.059597
Si	8.907803	1.530770	2.912138
Si	5.784986	5.054901	5.402183
Si	14.447734	12.974129	0.410413
Si	11.352246	4.749164	12.029963
Si	20.021786	6.930680	2.959449
Si	18.348900	2.298590	5.431479
Si	7.371310	5.982617	0.354068
Si	15.982125	7.421942	11.959909
Si	9.814614	13.783274	2.944521
Rh	20.166805	7.561007	6.459340
Rh	21.185587	9.530762	8.154156
Rh	22.595594	7.901088	6.286151
Rh	20.907635	9.642736	5.362108
C	20.775763	11.380629	9.173445
C	20.006445	10.344919	9.750465

$\pi\text{-C}_2\text{H}_4/\text{H}_7\text{Rh}_4$

161

generated by VMD

H	20.087118	10.397688	8.778542
H	21.853827	10.673507	6.745752
H	24.578337	8.291769	6.589819
H	24.194298	9.008130	6.250480
H	22.715155	8.485535	8.068565
H	20.441063	8.136202	8.118544
H	23.521423	11.048779	9.071703
H	21.132492	10.148134	10.857140
H	22.011992	12.034472	9.457920
H	22.628424	9.148499	10.470540
H	20.195992	9.496902	6.587287
O	19.187122	16.787125	14.051944
O	19.818596	5.710322	7.094561
O	6.135796	8.552540	3.056513
O	24.125586	18.941837	11.136210
O	8.672324	7.107155	11.089792
O	17.309343	12.856048	3.027869
O	16.741261	17.381142	7.096886
O	17.958706	7.483293	0.001570
O	24.156258	16.006237	2.878700
O	14.798235	11.419631	11.118864
O	10.500972	3.180773	0.027120

O	11.165087	14.257461	7.087832
O	15.464520	3.136130	0.104077
O	14.833494	14.381387	7.088181
O	11.127824	11.428644	11.166094
O	10.525812	1.072383	2.987171
O	25.944027	12.873518	3.079100
O	17.285946	7.095815	11.126063
O	26.527435	17.411398	7.085169
O	8.041426	7.486303	0.006701
O	10.453536	3.935932	11.192656
O	19.851336	8.610402	3.026924
O	15.472920	11.797492	0.038779
O	6.086521	5.748065	7.045832
O	19.933176	19.332315	13.709118
O	21.733805	4.442758	5.384688
O	21.649136	6.689166	2.546262
O	23.368031	19.309622	13.670592
O	26.653561	7.587715	13.647330
O	16.634287	15.402499	2.621408
O	14.907297	16.449108	5.391633
O	28.401518	10.549410	13.694180
O	26.746515	15.364878	2.595018
O	14.887766	10.577936	13.654521
O	16.593180	7.594451	13.656886
O	28.347807	16.355286	5.453468
O	19.715918	3.555208	8.638213
O	7.993300	12.355594	0.530850
O	6.244898	9.389898	0.506952
O	18.010771	4.564301	11.580562
O	12.963430	15.317474	8.756988
O	11.268679	0.657783	0.456693
O	14.653359	0.589713	0.380284
O	12.972245	13.324494	11.540882
O	6.257602	3.606298	8.605531
O	19.748486	9.426948	0.485624
O	18.036161	12.378637	0.493579
O	7.878686	4.593968	11.526854
O	11.021009	13.361301	2.024925
O	18.919315	3.834338	5.073812
O	6.851451	6.184565	2.017120
O	14.880368	6.375417	12.057631
O	11.055539	6.386641	12.075813
O	14.906136	13.490055	2.036325
O	7.014982	3.979927	5.254032
O	19.112679	6.221251	2.044098
O	17.268888	2.795876	2.053198
O	12.968875	9.708872	12.070093
O	8.750210	2.830693	2.025214
O	12.988774	14.634338	5.163086
O	21.640881	5.321913	9.035780
O	17.359001	17.168787	12.136751
O	21.676247	10.297082	2.100215
O	25.837746	17.141428	12.140368
O	27.776052	16.023712	8.993444
O	19.705622	6.529882	12.123045
O	23.548836	13.546189	2.042714
O	15.495852	13.796833	12.135688
O	15.472328	16.077242	9.060293
O	27.784304	13.825382	12.134949
O	19.710480	13.620802	2.103754
O	23.588259	6.605493	12.095301

O	12.992719	12.493777	0.495610
O	19.897211	6.510358	4.573897
O	6.100222	6.372687	4.540935
O	12.960573	4.594844	11.654162
O	10.474100	8.933465	11.639898
O	15.486279	13.968537	4.575542
O	8.704903	2.075274	4.567297
O	17.320608	4.972273	0.536298
O	17.201509	1.890290	4.590921
O	15.460002	8.923639	11.625662
O	8.658379	4.986284	0.498229
O	10.519014	13.882813	4.562962
O	19.131773	5.986008	9.615492
O	17.319674	14.981679	13.638702
O	24.170343	11.025667	2.553665
O	25.991135	17.887733	9.611079
O	28.480059	13.542446	9.600829
O	21.640680	7.495825	13.652406
O	21.664478	15.352832	2.473122
O	14.804343	13.565914	9.592339
O	17.309261	17.914902	9.602790
O	25.962563	14.983086	13.672334
O	19.185148	11.080243	2.533343
O	24.136625	6.059800	9.562724
Al	20.089441	5.008013	5.470695
Si	11.452838	13.001851	0.505680
Si	5.840803	6.941142	3.032977
Si	14.501525	4.797435	12.128752
Si	9.876656	7.502901	12.118447
Si	16.081156	13.930923	3.066329
Si	7.494782	2.460040	5.575148
Si	18.534962	6.053013	0.537849
Si	17.015785	1.517137	3.029206
Si	14.527579	10.158351	12.116207
Si	8.961936	3.391984	0.516372
Si	11.420111	14.791348	5.566729
Si	20.078539	5.147652	8.602659
Si	17.631283	16.574007	13.622499
Si	23.228647	9.810161	2.039732
Si	25.661446	18.389254	11.115495
Si	28.761654	14.794836	8.604152
Si	20.106892	6.964521	13.631343
Si	23.178589	15.124885	1.936989
Si	14.515856	13.025519	11.095966
Si	16.111053	17.495420	8.593705
Si	27.189411	13.921984	13.640137
Si	18.550615	12.492326	2.037097
Si	24.738987	6.089828	11.074346
Si	23.171738	6.955356	13.626961
Si	14.516813	14.836959	8.620117
Si	28.762665	13.030230	11.112127
Si	20.123632	15.185073	2.002315
Si	24.754242	12.458773	2.050249
Si	18.531567	6.043500	11.115448
Si	27.172018	17.475573	8.573276
Si	16.101147	13.912041	13.634059
Si	17.588293	18.414408	11.121525
Si	20.110199	9.854931	2.013722
Si	25.654045	16.577248	13.649049
Si	23.186968	5.180968	8.582299
Si	14.544773	14.861329	5.556755

Si	17.014442	3.374876	0.556763
Si	11.411030	10.158905	12.146685
Si	8.983143	1.589421	3.046003
Si	5.848585	5.074610	5.527501
Si	14.523435	13.028045	0.527291
Si	11.432188	4.809927	12.160031
Si	20.119005	6.996292	3.057468
Si	18.423437	2.395949	5.546310
Si	7.441879	6.056513	0.507754
Si	16.055765	7.494478	12.116577
Si	9.891128	13.879482	3.067992
Rh	20.342651	7.721583	6.542282
Rh	21.483089	9.730314	5.417492
Rh	21.349977	9.723018	8.152509
Rh	22.865385	7.985062	6.542756
C	22.476185	11.047392	9.395738
C	21.977976	9.981462	10.185734

$\pi\text{-C}_2\text{H}_4/\text{H}_9\text{Rh}_4$

163

generated by VMD

H	23.179012	8.838300	7.670430
H	21.489231	7.708335	7.282297
H	20.024414	10.895354	5.241827
H	19.867704	9.231298	5.400566
H	19.840511	8.591323	7.624388
H	23.109922	9.438965	5.588820
H	7.237741	8.328982	6.375154
H	20.982876	10.571598	7.061397
H	22.195185	9.439699	10.835876
H	22.388451	10.455264	8.732118
H	21.293428	7.879901	10.435426
H	19.270039	9.227070	9.792965
H	20.194696	10.787266	10.131526
O	19.052418	16.732435	13.943989
O	19.687929	5.726080	6.954316
O	6.131720	8.488565	2.860838
O	24.009188	18.901060	11.007645
O	25.878983	7.057292	10.977196
O	17.203653	12.847056	2.905219
O	16.607779	17.365208	6.960224
O	26.558689	12.471362	14.092661
O	15.359344	0.961874	2.754289
O	14.687961	11.375925	10.986817
O	19.029554	8.153126	14.019502
O	28.362076	14.249080	6.951810
O	24.006502	8.105150	14.066270
O	14.715627	14.335296	6.948880
O	28.340155	11.373501	10.985448
O	10.383946	1.020899	2.855454
O	25.812729	12.858354	2.937664
O	17.164953	7.061887	10.999450
O	26.404722	17.363405	6.948561
O	16.494272	12.461158	14.069035
O	18.999176	18.904890	11.046318
O	19.588106	8.519145	2.790802
O	23.998390	16.740973	14.014934
O	23.317921	5.715628	6.910752
O	19.811068	19.269197	13.562697

O	21.608467	4.443963	5.242500
O	21.539574	6.710011	2.443838
O	23.231869	19.259041	13.537196
O	26.552908	7.552375	13.522243
O	16.485600	15.380753	2.473430
O	14.773266	16.417225	5.268051
O	28.280447	10.519115	13.519548
O	26.620819	15.347727	2.452269
O	14.738358	10.526731	13.522672
O	16.469402	7.548047	13.530465
O	28.232784	16.339840	5.303557
O	19.575026	3.561253	8.479366
O	7.856253	12.321177	0.396709
O	6.071943	9.423545	0.356510
O	17.900707	4.526814	11.427578
O	12.846532	15.262445	8.621898
O	11.143004	0.635345	0.328492
O	14.527929	0.568653	0.256752
O	12.841105	13.267296	11.382681
O	6.112604	3.565075	8.468844
O	19.684320	9.464534	0.314048
O	17.891195	12.362850	0.364835
O	7.755393	4.543922	11.408275
O	10.895381	13.339083	1.890746
O	18.788469	3.819654	4.961419
O	6.699468	6.051320	1.907684
O	14.759220	6.328596	11.929161
O	10.931992	6.333562	11.941783
O	14.795567	13.429037	1.894850
O	6.880697	3.946184	5.099342
O	19.050814	6.052392	1.909910
O	17.125925	2.777657	1.911792
O	12.842972	9.663057	11.903129
O	8.633583	2.806145	1.892155
O	12.859225	14.599070	5.035498
O	21.517128	5.317661	8.880269
O	17.246683	17.119383	12.009036
O	21.543821	10.184805	2.080526
O	25.728882	17.103264	12.004345
O	27.683603	16.021366	8.869719
O	19.586876	6.491035	11.994773
O	23.414574	13.522067	1.908974
O	15.355132	13.752674	12.011682
O	15.348116	16.036074	8.916215
O	27.656563	13.747147	12.006953
O	19.602045	13.580605	1.954122
O	23.443516	6.543586	11.957839
O	12.865191	12.439067	0.372806
O	19.766998	6.495176	4.436049
O	5.991199	6.379621	4.438303
O	12.838869	4.548336	11.510072
O	10.351146	8.878238	11.488146
O	15.355262	13.942077	4.431738
O	8.568373	2.036724	4.429596
O	17.200037	4.946556	0.370820
O	17.081558	1.875417	4.448953
O	15.338360	8.879533	11.497266
O	8.522855	4.954967	0.341210
O	10.385035	13.868070	4.425133
O	19.023764	5.995326	9.484316
O	17.175041	14.936424	13.517729

O	24.030592	11.007783	2.430508
O	25.868036	17.855642	9.471897
O	28.331696	13.520055	9.463259
O	21.517523	7.470623	13.521449
O	21.534838	15.333157	2.346703
O	14.696510	13.521537	9.457735
O	17.168549	17.875694	9.473435
O	25.866116	14.947797	13.544747
O	19.047836	11.042881	2.385772
O	24.019632	6.004963	9.434998
Al	19.961365	4.990092	5.342791
Si	11.325601	12.951084	0.377558
Si	5.746676	6.907067	2.902560
Si	14.376181	4.750871	11.996183
Si	9.756911	7.453405	11.986446
Si	15.957911	13.900527	2.925480
Si	7.362135	2.428514	5.437425
Si	18.440702	5.999161	0.404463
Si	16.887632	1.496644	2.889562
Si	14.399601	10.113576	11.977787
Si	8.836285	3.362149	0.380031
Si	11.290016	14.771046	5.429212
Si	19.949938	5.148684	8.458760
Si	17.498178	16.527344	13.500875
Si	23.109442	9.774164	1.922849
Si	25.544491	18.349638	10.980162
Si	28.636248	14.769151	8.470723
Si	19.983915	6.939095	13.501743
Si	23.048794	15.101158	1.811652
Si	14.391767	12.979469	10.958568
Si	15.975638	17.461159	8.457756
Si	27.107487	13.899559	13.524518
Si	18.429613	12.462303	1.902268
Si	24.610683	6.036958	10.949865
Si	23.045830	6.921727	13.487579
Si	14.400178	14.788071	8.481830
Si	28.628849	12.977448	10.960870
Si	19.996777	15.150151	1.870438
Si	24.619129	12.432923	1.917189
Si	18.412767	6.013134	10.984537
Si	27.051418	17.454918	8.434011
Si	15.934157	13.889825	13.519415
Si	17.462679	18.365879	10.992291
Si	19.972137	9.810867	1.886091
Si	25.535763	16.537840	13.513681
Si	23.068945	5.147335	8.443313
Si	14.417194	14.826184	5.422071
Si	16.894974	3.347299	0.407382
Si	11.284406	10.111894	11.976262
Si	8.847133	1.554935	2.906406
Si	5.733161	5.050449	5.396384
Si	14.397908	12.971108	0.388947
Si	11.308953	4.756496	12.017512
Si	19.983191	6.945459	2.897527
Si	18.301014	2.369839	5.410226
Si	7.284679	6.001429	0.388715
Si	15.930706	7.450963	11.991548
Si	9.761256	13.860174	2.927950
Rh	20.161713	7.720909	6.290064
Rh	21.464870	9.310128	8.186495
Rh	23.059288	7.998157	6.278375

Rh	21.292913	10.011236	5.524783
C	20.239592	9.717215	9.914246
C	21.373163	8.962885	10.298656

η -C₂H₅/Rh₄

155

generated by VMD

H	17.288891	11.011055	7.278114
H	18.997709	10.896752	7.744771
H	17.863216	9.774724	8.480702
H	18.254148	8.226456	6.641641
H	17.879560	9.527897	5.419813
O	10.558176	11.728076	-0.014069
O	20.052107	5.807647	7.106831
O	6.305579	8.518720	3.106826
O	24.194752	18.891584	11.178197
O	8.720027	7.027225	11.103580
O	17.387259	12.820388	3.090486
O	16.778215	17.336639	7.106762
O	18.092707	7.466244	0.110798
O	24.181850	15.998372	2.898905
O	14.898292	11.371076	11.151172
O	10.557984	3.150033	0.061810
O	11.168365	14.300099	7.103782
O	15.521742	3.097880	0.064411
O	14.880917	14.284202	7.088540
O	11.149220	11.359993	11.097939
O	19.215384	16.028111	2.982260
O	8.651786	12.829329	3.071962
O	17.310461	7.040364	11.101628
O	26.549831	17.256727	7.112796
O	16.701168	12.416706	14.107404
O	19.183937	18.885775	11.190292
O	19.691988	8.490727	2.896988
O	15.498620	11.722739	-0.005867
O	6.055562	5.620257	7.073983
O	19.978317	19.256811	13.711063
O	21.754642	4.440339	5.299776
O	21.717760	6.760879	2.585938
O	23.400791	19.252119	13.702190
O	26.722750	7.544956	13.648277
O	16.653454	15.343931	2.625201
O	14.942367	16.379999	5.422118
O	28.449135	10.506201	13.631661
O	26.760822	15.333034	2.595279
O	14.899355	10.488538	13.674036
O	16.669113	7.533173	13.648814
O	28.402056	16.361355	5.413029
O	19.699553	3.595608	8.551023
O	8.008524	12.317200	0.527692
O	6.266616	9.326485	0.529990
O	18.091570	4.528093	11.562883
O	13.037453	15.250564	8.764693
O	11.314127	0.618807	0.450418
O	14.699565	0.560539	0.397637
O	13.009217	13.227952	11.519532
O	6.301452	3.509848	8.689137
O	19.836727	9.498995	0.448104
O	18.037914	12.315376	0.543796

O	7.935426	4.511739	11.529490
O	11.073474	13.349656	2.048957
O	18.897137	3.852430	5.232510
O	6.877655	6.152413	2.018081
O	14.922874	6.319049	12.087021
O	11.111167	6.317226	12.084524
O	14.986533	13.373028	2.041353
O	7.025266	3.912093	5.254416
O	19.254576	6.012918	2.030763
O	17.298929	2.770388	2.040341
O	13.014083	9.670741	12.009410
O	8.775621	2.774388	2.030354
O	13.013616	14.583798	5.187881
O	21.697323	5.234209	9.138840
O	17.436121	17.097836	12.152975
O	21.713127	10.120782	2.224416
O	25.931900	17.107029	12.162293
O	27.897184	16.053444	9.065723
O	19.729824	6.531057	12.125902
O	23.593163	13.530025	2.065306
O	15.506171	13.785859	12.141966
O	15.559655	15.976965	9.055595
O	27.831781	13.730206	12.147894
O	19.761179	13.572464	2.086871
O	23.634422	6.519494	12.093924
O	13.030955	12.427299	0.526023
O	19.898359	6.471021	4.560553
O	6.201033	6.313635	4.561171
O	13.017753	4.526909	11.666226
O	10.527564	8.856216	11.605824
O	15.505358	13.900833	4.578166
O	8.726484	2.009093	4.575089
O	17.375374	4.938274	0.498213
O	17.248716	1.891388	4.584529
O	15.506202	8.864510	11.631187
O	8.681520	4.934389	0.503969
O	10.533500	13.877071	4.580563
O	19.193876	6.002524	9.601846
O	17.341747	14.927576	13.671913
O	24.182148	11.006283	2.552023
O	26.035376	17.849661	9.621952
O	28.505062	13.526529	9.600383
O	21.690966	7.453419	13.640917
O	21.695082	15.324492	2.479321
O	14.864527	13.478773	9.590073
O	17.380932	17.818680	9.613407
O	26.018885	14.922627	13.666961
O	19.245342	11.038245	2.572254
O	24.198244	5.983262	9.559885
Al	20.121737	5.002110	5.514627
Si	11.493670	12.947260	0.535953
Si	5.919696	6.908520	3.090411
Si	14.551924	4.738729	12.157716
Si	9.931956	7.433974	12.115541
Si	16.129721	13.865920	3.081232
Si	7.519876	2.410305	5.587656
Si	18.625425	5.981866	0.537004
Si	17.047586	1.501310	3.030604
Si	14.573367	10.099998	12.121269
Si	9.007581	3.345012	0.528388
Si	11.445498	14.791592	5.572186

Si	20.160480	5.167567	8.592120
Si	17.667173	16.519312	13.650029
Si	23.291706	9.743234	2.068649
Si	25.732740	18.347834	11.132083
Si	28.815729	14.791017	8.626001
Si	20.151564	6.935100	13.637400
Si	23.214903	15.106509	1.955128
Si	14.564333	12.966329	11.101177
Si	16.165556	17.420551	8.612936
Si	27.275967	13.891352	13.661715
Si	18.601122	12.441882	2.067023
Si	24.789034	6.005371	11.072648
Si	23.221909	6.906384	13.616336
Si	14.582809	14.755262	8.620385
Si	28.794271	12.962342	11.091407
Si	20.158918	15.142156	1.996922
Si	24.786924	12.432671	2.053251
Si	18.583298	6.016918	11.099742
Si	27.219027	17.453794	8.579930
Si	16.119213	13.862313	13.640858
Si	17.651028	18.337822	11.125629
Si	20.125513	9.786462	2.030748
Si	25.699926	16.515461	13.654981
Si	23.225918	5.088793	8.601708
Si	14.575285	14.796820	5.568773
Si	17.066410	3.339535	0.535800
Si	11.449999	10.100553	12.089836
Si	9.003505	1.532588	3.052130
Si	5.880668	5.040185	5.542742
Si	14.567395	12.948289	0.532153
Si	11.485818	4.739813	12.164952
Si	20.150681	6.930266	3.037554
Si	18.450720	2.365206	5.580218
Si	7.455997	5.997486	0.513899
Si	16.101879	7.434962	12.121534
Si	9.923487	13.856369	3.077780
Rh	20.939661	7.727918	6.157509
Rh	20.171621	10.128107	6.306752
Rh	22.146341	9.360345	7.532652
Rh	22.135380	9.570711	5.063170
C	18.323956	9.291817	6.401614
C	18.059267	10.264516	7.517078

η -C₂H₅/H₂Rh₄

157

generated by VMD

H	22.953304	8.598366	7.851103
H	21.667768	10.680190	6.323973
H	20.053799	9.998871	10.308898
H	20.851471	8.883830	9.209967
H	19.075428	8.812095	9.337429
H	18.891394	10.468007	7.530101
H	19.953192	11.623936	8.470175
O	19.078974	16.765812	14.043641
O	19.765947	5.879726	6.990108
O	5.905067	8.577590	3.095298
O	15.407538	3.925053	11.041043
O	8.562361	7.078444	11.034013
O	17.244642	12.795504	2.940571

O	16.622393	17.416557	7.013391
O	17.886879	7.494722	0.016629
O	15.382646	1.009189	2.825838
O	14.734818	11.416029	11.149899
O	10.442458	3.150225	0.000630
O	11.016398	14.354805	6.995906
O	15.421059	3.077401	-0.048203
O	14.781529	14.230088	6.998950
O	11.116252	11.350885	10.933802
O	19.103386	15.987959	2.912382
O	8.592287	12.793887	2.941370
O	17.221729	7.098373	11.046411
O	26.507219	17.303183	6.987479
O	16.659498	12.393315	13.918654
O	19.087475	18.871429	11.062795
O	19.782907	8.499691	2.711953
O	24.031116	16.749989	13.996325
O	6.160764	5.560953	6.969748
O	19.857527	19.284597	13.582402
O	21.637203	4.472152	5.312587
O	21.630001	6.558769	2.473921
O	23.287683	19.280752	13.575638
O	26.642347	7.573878	13.558595
O	16.532337	15.333765	2.537893
O	14.835959	16.333012	5.351396
O	28.272608	10.584468	13.488556
O	26.614014	15.329081	2.487786
O	14.784605	10.504273	13.665372
O	16.549856	7.545858	13.594585
O	28.329376	16.383940	5.265141
O	19.598619	3.664398	8.472560
O	7.850574	12.300353	0.417752
O	6.235645	9.236645	0.512182
O	17.971539	4.561974	11.439607
O	12.933620	15.251152	8.633889
O	11.197991	0.612000	0.381678
O	14.584189	0.548319	0.329268
O	12.859253	13.305836	11.435480
O	6.113571	3.487928	8.627003
O	19.692549	9.483463	0.253543
O	17.920343	12.339413	0.390712
O	7.865215	4.539938	11.478191
O	10.997138	13.413989	1.938396
O	18.836510	3.879199	5.071631
O	6.863390	6.339011	1.948315
O	14.820949	6.359555	11.984423
O	10.967533	6.325074	11.938326
O	14.846024	13.395746	1.917994
O	6.874945	3.855995	5.048625
O	19.111025	6.046798	1.900285
O	17.182011	2.777508	1.940435
O	12.899291	9.663838	12.003829
O	8.675956	2.760681	1.977328
O	12.901581	14.551073	5.110914
O	21.585398	5.342345	8.893994
O	17.328178	17.104231	12.051901
O	21.591461	10.301813	1.910132
O	25.797445	17.139692	12.016324
O	27.818272	16.109911	8.972974
O	19.626568	6.536592	12.064135
O	23.513666	13.534314	2.018264

O	15.360874	13.843815	12.077558
O	15.455035	15.963061	8.932940
O	27.628040	13.656912	11.996803
O	19.639334	13.540160	1.985314
O	23.483847	6.483525	12.012089
O	12.910156	12.452420	0.381772
O	19.797836	6.516402	4.421437
O	6.123671	6.319045	4.476172
O	12.906797	4.571609	11.542823
O	10.420334	8.873918	11.494408
O	15.381338	13.864858	4.467500
O	8.625808	1.962705	4.510459
O	17.230330	4.948040	0.398311
O	17.162550	1.914736	4.482450
O	15.407164	8.916292	11.599840
O	8.571164	4.933755	0.481450
O	10.418543	13.896871	4.472897
O	19.113832	6.078986	9.534309
O	17.254143	14.933489	13.572882
O	24.085667	10.992572	2.479716
O	25.923906	17.892717	9.484576
O	28.385925	13.554124	9.478437
O	21.577782	7.451155	13.588346
O	21.579643	15.286793	2.406288
O	14.738384	13.485330	9.527127
O	17.221666	17.852953	9.522650
O	25.872368	14.949196	13.504911
O	19.081560	10.995394	2.389072
O	24.097715	5.947373	9.490199
Al	20.003523	5.074579	5.426678
Si	11.379860	12.986857	0.421987
Si	5.781367	6.929603	2.997679
Si	14.440919	4.779959	12.035450
Si	9.810399	7.460458	12.011672
Si	15.998239	13.849552	2.966652
Si	7.396132	2.381067	5.482819
Si	18.455395	6.017107	0.415895
Si	16.926817	1.514098	2.937100
Si	14.450037	10.127715	12.105618
Si	8.894884	3.343194	0.478320
Si	11.334069	14.808969	5.462219
Si	20.012691	5.249931	8.459010
Si	17.545595	16.531908	13.553559
Si	23.130526	9.786756	1.972166
Si	25.611427	18.387785	10.994246
Si	28.700949	14.825387	8.515278
Si	20.038084	6.934357	13.579735
Si	23.105986	15.101216	1.890579
Si	14.418420	13.010873	11.046971
Si	16.014595	17.431355	8.523967
Si	27.099308	13.885921	13.510159
Si	18.464544	12.423768	1.926041
Si	24.670393	6.012013	11.007465
Si	23.102034	6.887974	13.539619
Si	14.474317	14.733675	8.519053
Si	28.669218	12.968870	10.961945
Si	20.045061	15.108310	1.919551
Si	24.687706	12.418635	1.965193
Si	18.480341	6.056225	11.022418
Si	27.135651	17.504183	8.469883
Si	16.044922	13.855620	13.547999

Si	17.543531	18.349543	11.031970
Si	20.036617	9.818357	1.813408
Si	25.571589	16.544867	13.508305
Si	23.132795	5.085232	8.510586
Si	14.466992	14.746794	5.482378
Si	16.955967	3.343410	0.435237
Si	11.339434	10.119840	11.980531
Si	8.896908	1.501536	2.980062
Si	5.790530	5.002733	5.434899
Si	14.445087	12.975536	0.402618
Si	11.369107	4.756008	12.033370
Si	20.077135	6.911039	2.880386
Si	18.387659	2.399400	5.446563
Si	7.383875	6.035716	0.438430
Si	15.998704	7.474801	12.058000
Si	9.823320	13.868435	2.965948
Rh	20.632668	7.826485	6.014347
Rh	21.392126	9.522469	7.621933
Rh	23.063168	7.789120	6.422636
Rh	22.130247	9.630328	5.115938
C	19.734953	10.577391	8.220100
C	19.857298	9.581003	9.310966

η -C₂H₅/H₄Rh₄

159

generated by VMD

H	20.121284	9.368152	5.601344
H	22.718843	8.444118	8.102110
H	21.487591	10.716907	6.958228
H	20.017828	8.492167	7.904169
H	22.776628	10.293303	10.832220
H	19.942434	9.184178	10.539527
H	21.237177	11.255013	10.769123
H	21.492186	8.214945	10.616014
H	22.085186	10.820167	9.276820
O	19.188774	16.780100	14.065555
O	19.821692	5.826825	7.050776
O	23.474293	8.572654	3.086654
O	15.490747	3.925451	11.099175
O	8.669225	7.099339	11.080353
O	17.337904	12.832531	2.991601
O	16.751003	17.362616	7.060632
O	18.007093	7.512537	0.044876
O	15.492238	1.019247	2.867041
O	14.835034	11.435657	11.133422
O	10.525404	3.168371	0.020573
O	11.123479	14.330918	7.039586
O	15.509135	3.131688	0.005087
O	14.875706	14.331869	7.046740
O	11.160351	11.394206	11.023846
O	10.536889	1.043662	2.943511
O	8.661033	12.855191	2.999233
O	17.319988	7.113188	11.089528
O	26.579973	17.368576	7.034479
O	16.728071	12.442662	13.989864
O	19.161091	18.931499	11.115269
O	19.835735	8.547642	2.831108
O	24.138281	16.787605	14.069619
O	6.203431	5.718042	7.004056

O	19.948568	19.309055	13.636306
O	21.758636	4.502272	5.374620
O	21.713932	6.657958	2.532913
O	23.380207	19.314005	13.628551
O	26.720716	7.592791	13.612860
O	16.644278	15.373402	2.579732
O	14.924314	16.402914	5.359519
O	28.401627	10.585220	13.570174
O	26.736174	15.372832	2.535306
O	14.885304	10.533963	13.648393
O	16.623194	7.576951	13.621599
O	28.409473	16.393969	5.352613
O	19.719950	3.630746	8.543558
O	7.971919	12.330367	0.469076
O	6.309981	9.333316	0.523103
O	18.047447	4.577209	11.520030
O	12.995936	15.295044	8.685492
O	11.310248	0.643486	0.422509
O	14.678419	0.598853	0.367907
O	12.959170	13.311764	11.480368
O	6.255173	3.574028	8.571786
O	19.800434	9.500854	0.352063
O	18.033077	12.376966	0.446406
O	7.925909	4.572205	11.516102
O	11.074417	13.416016	1.980191
O	18.952372	3.883647	5.086501
O	6.921920	6.269329	1.957898
O	14.910634	6.375651	12.009535
O	11.074933	6.366232	12.008193
O	14.939924	13.445253	1.976741
O	7.015939	3.925879	5.193353
O	19.206621	6.096673	1.968902
O	17.270084	2.812120	1.995362
O	12.989425	9.700537	12.003336
O	8.756038	2.807192	1.998249
O	13.000758	14.595976	5.149610
O	21.676542	5.349869	8.945712
O	17.417763	17.146612	12.095659
O	21.699560	10.284750	2.034226
O	25.890018	17.146881	12.074837
O	27.852964	16.089327	8.994732
O	19.730772	6.536471	12.103358
O	23.593735	13.561871	2.027701
O	15.459154	13.853852	12.106257
O	15.497829	16.043901	9.017445
O	27.752123	13.740097	12.064731
O	19.731712	13.596198	2.051720
O	23.579380	6.549516	12.054391
O	13.010691	12.482738	0.438312
O	19.900438	6.540436	4.500281
O	6.228073	6.335295	4.482947
O	12.993057	4.590396	11.595873
O	10.499942	8.910139	11.559830
O	15.488930	13.925913	4.522004
O	8.722543	2.028477	4.536425
O	17.341038	4.979857	0.451492
O	17.251747	1.932852	4.534154
O	15.490857	8.928600	11.598020
O	8.674458	4.968562	0.466448
O	10.521848	13.916703	4.513233
O	19.189789	6.044920	9.588534

O	17.347994	14.962594	13.593582
O	24.183048	11.033605	2.530511
O	26.019415	17.919701	9.546069
O	28.475067	13.564548	9.534553
O	21.668060	7.499135	13.623845
O	21.681774	15.332658	2.454482
O	14.818130	13.539539	9.556670
O	17.312880	17.899544	9.565573
O	25.980705	14.978180	13.595933
O	19.198963	11.050676	2.460070
O	24.179422	6.010329	9.536283
Al	20.117085	5.076085	5.450614
Si	11.475068	13.003640	0.465139
Si	5.899477	6.952331	3.012582
Si	14.529571	4.797997	12.083587
Si	9.905252	7.489523	12.070970
Si	16.100294	13.896311	3.018789
Si	7.507301	2.419650	5.536629
Si	18.573210	6.043321	0.477401
Si	17.028887	1.540386	2.984217
Si	14.544967	10.151890	12.095299
Si	8.979288	3.375324	0.493606
Si	11.431322	14.820102	5.514201
Si	20.103336	5.219394	8.535910
Si	17.647783	16.558008	13.590054
Si	23.251705	9.803032	2.031767
Si	25.698816	18.400007	11.059245
Si	28.776424	14.827538	8.557837
Si	20.134905	6.961137	13.612656
Si	23.202000	15.134113	1.924547
Si	14.515538	13.033017	11.069598
Si	16.118187	17.471743	8.556332
Si	27.216339	13.923722	13.583437
Si	18.568354	12.468699	1.985619
Si	24.759138	6.055449	11.052626
Si	23.194073	6.941726	13.585342
Si	14.545268	14.803168	8.571205
Si	28.758953	13.004600	11.027773
Si	20.146076	15.160350	1.966995
Si	24.777868	12.453352	2.005210
Si	18.567467	6.061968	11.079276
Si	27.213497	17.510637	8.520885
Si	16.122166	13.899874	13.586366
Si	17.623699	18.393511	11.078505
Si	20.137306	9.845168	1.913064
Si	25.676809	16.573446	13.578128
Si	23.228439	5.161332	8.535081
Si	14.563086	14.816026	5.519965
Si	17.048176	3.379326	0.490470
Si	11.429111	10.150043	12.042265
Si	8.994062	1.557628	3.009526
Si	5.902486	5.070445	5.481032
Si	14.543965	13.013244	0.463191
Si	11.459406	4.791669	12.091166
Si	20.159901	6.959457	2.967634
Si	18.476015	2.421894	5.496265
Si	7.468290	6.052098	0.448477
Si	16.084280	7.495773	12.081245
Si	9.915988	13.899798	3.010229
Rh	20.293388	7.848844	6.401066
Rh	21.760805	9.811357	5.592684

Rh	21.360136	9.503615	8.282592
Rh	22.769753	7.814091	6.574161
C	21.785486	10.390706	10.370171
C	21.006399	9.136234	10.275303

η -C₂H₅/H₆Rh₄

161

generated by VMD

H	20.216883	10.922242	4.983920
H	19.944551	9.195376	5.448522
H	20.367933	8.428077	7.812583
H	23.144468	9.352615	5.721194
H	23.029245	8.594761	7.836473
H	21.140495	10.787601	6.803164
H	21.846422	10.799384	10.848796
H	21.996099	9.405989	9.771920
H	20.603603	9.474213	10.882560
H	19.326843	10.637831	9.135951
H	20.611355	11.937859	9.062755
O	19.057985	16.691866	13.961388
O	19.906311	5.766838	6.968590
O	6.166145	8.455941	2.883725
O	24.037169	18.887476	11.007138
O	8.566198	6.996473	10.947852
O	17.242090	12.839986	2.907417
O	16.649979	17.327209	6.960684
O	26.582254	12.437983	14.063682
O	24.040115	15.977960	2.734128
O	14.741899	11.340343	11.008997
O	19.051912	8.156178	14.010662
O	11.025981	14.283683	6.951958
O	24.019924	8.071679	14.049072
O	14.728040	14.258985	6.943201
O	10.993683	11.334636	10.948165
O	19.055189	15.984382	2.850180
O	25.823921	12.822509	2.943645
O	17.148060	6.999877	10.979644
O	26.399038	17.208370	6.964468
O	16.465166	12.416203	14.077773
O	19.016209	18.850063	11.057134
O	19.531160	8.477401	2.766071
O	24.000334	16.681019	14.000772
O	23.213787	5.620012	6.930030
O	19.830515	19.225393	13.568048
O	21.589434	4.400090	5.126095
O	21.528545	6.718973	2.507487
O	23.242220	19.203262	13.537797
O	26.563770	7.520454	13.490818
O	16.477144	15.357926	2.470551
O	14.797997	16.367065	5.294022
O	28.288675	10.472540	13.475463
O	26.621994	15.315016	2.447979
O	14.716071	10.468969	13.537597
O	16.505779	7.503987	13.523443
O	28.254177	16.338718	5.255012
O	19.545702	3.559415	8.396746
O	7.859046	12.276311	0.405948
O	6.072578	9.397728	0.378878
O	17.937981	4.486623	11.424376

O	12.889709	15.223325	8.624524
O	11.154761	0.632333	0.317277
O	14.528530	0.542585	0.240676
O	12.857083	13.200277	11.369277
O	6.132069	3.480115	8.483479
O	19.714056	9.431686	0.301225
O	17.879070	12.345387	0.358044
O	7.772051	4.489740	11.414265
O	10.905444	13.308975	1.899469
O	18.748419	3.828309	5.112002
O	6.667179	6.012570	1.922105
O	14.754117	6.294569	11.959687
O	10.952233	6.284802	11.936387
O	14.824366	13.370214	1.889497
O	6.872840	3.901246	5.126325
O	19.082014	6.002227	1.863166
O	17.155376	2.751659	1.884121
O	12.855399	9.636268	11.855374
O	8.662756	2.772457	1.886616
O	12.871096	14.570137	5.035052
O	21.534761	5.202739	9.003420
O	17.259644	17.066360	12.020021
O	21.542551	10.113084	2.124533
O	25.734791	17.069731	11.996470
O	27.748314	16.022430	8.925995
O	19.578058	6.500003	11.977773
O	23.435959	13.510790	1.910044
O	15.351010	13.736257	12.025627
O	15.407698	15.958317	8.897811
O	27.682459	13.715713	11.988638
O	19.629486	13.549168	1.910356
O	23.471762	6.509865	11.937872
O	12.873912	12.391238	0.386676
O	19.657877	6.443558	4.413185
O	6.021855	6.343589	4.468734
O	12.855676	4.496696	11.509363
O	10.372003	8.826009	11.445207
O	15.363663	13.898997	4.423627
O	8.576557	2.010947	4.421806
O	17.210745	4.916795	0.332583
O	17.100554	1.877551	4.428592
O	15.352369	8.837762	11.507970
O	8.505157	4.922057	0.353105
O	10.391813	13.852509	4.430828
O	19.027025	5.961158	9.464807
O	17.181618	14.888695	13.540473
O	24.014797	10.989947	2.448952
O	25.881218	17.825699	9.467499
O	28.357332	13.491952	9.443302
O	21.532558	7.452818	13.478504
O	21.545677	15.313978	2.334420
O	14.726541	13.465733	9.460990
O	17.197004	17.818941	9.481242
O	25.895479	14.916031	13.533312
O	19.055937	11.016259	2.358260
O	24.053165	5.928045	9.416926
Al	19.964437	4.996184	5.351086
Si	11.336470	12.910511	0.389199
Si	5.742506	6.881215	2.938907
Si	14.389687	4.711114	12.002903
Si	9.778127	7.406423	11.960733

Si	15.975031	13.866801	2.920615
Si	7.379366	2.388785	5.446519
Si	18.459953	5.962113	0.368841
Si	16.904425	1.482063	2.874773
Si	14.411881	10.073049	11.979993
Si	8.853123	3.336284	0.376968
Si	11.302331	14.770602	5.419173
Si	19.994223	5.127799	8.462980
Si	17.505186	16.480747	13.515736
Si	23.114338	9.736300	1.948921
Si	25.566792	18.321213	10.976625
Si	28.669035	14.762228	8.478271
Si	19.993145	6.930741	13.485261
Si	23.061842	15.087004	1.801448
Si	14.415868	12.937033	10.964805
Si	16.012978	17.397570	8.458010
Si	27.138260	13.868231	13.509105
Si	18.447025	12.439317	1.885251
Si	24.635035	5.979040	10.936579
Si	23.059689	6.891170	13.464248
Si	14.434813	14.726158	8.476446
Si	28.643276	12.936281	10.938924
Si	20.009893	15.123119	1.853032
Si	24.623739	12.404416	1.926428
Si	18.419954	5.979957	10.966712
Si	27.062824	17.414822	8.431355
Si	15.926879	13.855837	13.536668
Si	17.480576	18.310877	11.001206
Si	19.967791	9.764992	1.885924
Si	25.543751	16.500643	13.504568
Si	23.059629	5.054575	8.476527
Si	14.431486	14.776877	5.424244
Si	16.911871	3.317615	0.380270
Si	11.292968	10.070628	11.933648
Si	8.854315	1.519191	2.901460
Si	5.702403	4.993600	5.384736
Si	14.410317	12.914705	0.387769
Si	11.327425	4.707436	12.021038
Si	19.946342	6.907912	2.905068
Si	18.300875	2.337280	5.433191
Si	7.256084	5.958042	0.405770
Si	15.938402	7.404861	11.994530
Si	9.767960	13.832683	2.933399
Rh	20.400635	7.772530	6.288210
Rh	21.564878	9.625233	8.054626
Rh	22.950716	7.884704	6.362391
Rh	21.420519	9.982795	5.388115
C	20.393330	10.873859	9.214926
C	21.172234	10.169671	10.252114

$\eta\text{-C}_2\text{H}_5/\text{H}_8\text{Rh}_4$

163

generated by VMD

H	23.245687	8.813530	7.632088
H	21.554441	7.643767	7.263096
H	20.201754	10.923746	5.233027
H	20.066046	9.195636	5.260211
H	19.913004	8.594340	7.643205
H	23.235521	9.370347	5.562557

H	7.322050	8.205238	6.390316
H	21.207132	10.379758	7.080321
H	21.634527	11.304325	10.354411
H	22.443079	10.036168	9.448949
H	21.977594	9.704348	11.147256
H	19.831259	8.846975	10.350318
H	19.493473	10.441659	9.517936
O	19.041868	16.719656	13.939411
O	19.687803	5.720453	6.957512
O	6.124256	8.481197	2.861731
O	15.335089	3.886421	11.010363
O	8.532641	7.039459	10.964765
O	17.199936	12.839982	2.908182
O	16.587927	17.381197	6.957570
O	26.552988	12.461950	14.099483
O	24.014124	15.976559	2.749722
O	14.680211	11.363910	10.994558
O	19.023569	8.151479	14.033905
O	28.357403	14.248343	6.947325
O	23.991060	8.105184	14.060856
O	14.683536	14.299124	6.945262
O	10.985409	11.356880	10.971581
O	10.367341	1.004779	2.839293
O	25.794888	12.849351	2.939313
O	17.132597	7.033183	10.989854
O	26.394384	17.357594	6.946446
O	16.477333	12.443411	14.060525
O	18.987097	18.887049	11.049756
O	19.554863	8.501826	2.755252
O	23.973499	16.717075	14.005253
O	23.316450	5.648251	6.912982
O	19.798815	19.258665	13.564806
O	21.586246	4.441234	5.214567
O	21.527945	6.704793	2.459768
O	23.218384	19.241022	13.540313
O	26.532694	7.535309	13.512922
O	16.465042	15.367247	2.471627
O	14.764542	16.392460	5.278894
O	28.271097	10.512663	13.510330
O	26.602558	15.338266	2.445788
O	14.715340	10.510666	13.530349
O	16.470579	7.530021	13.527501
O	28.221737	16.338413	5.298187
O	19.568392	3.547861	8.481465
O	7.846448	12.296487	0.398671
O	6.071980	9.417192	0.359123
O	17.898703	4.511718	11.440494
O	12.837970	15.260838	8.624205
O	11.151683	0.631515	0.314941
O	14.501695	0.572916	0.253312
O	12.823977	13.247947	11.387866
O	6.083688	3.525493	8.509188
O	19.669907	9.470298	0.293706
O	17.860491	12.348433	0.363188
O	7.744667	4.528055	11.412708
O	10.875871	13.326141	1.890292
O	18.772293	3.821818	4.960874
O	6.682766	6.044905	1.911825
O	14.732949	6.321669	11.947325
O	10.922039	6.318786	11.939461
O	14.788489	13.403301	1.893946

O	6.854363	3.918403	5.059955
O	19.048204	6.023791	1.907529
O	17.112974	2.769582	1.903629
O	12.830023	9.649904	11.895054
O	8.615026	2.793227	1.895256
O	12.843367	14.589983	5.020085
O	21.504900	5.301712	8.889717
O	17.232244	17.101631	12.008389
O	21.529163	10.166435	2.059587
O	25.709139	17.088829	12.000193
O	27.667576	16.010550	8.867303
O	19.558599	6.515902	11.986086
O	23.408199	13.520071	1.893251
O	15.338671	13.746584	12.010392
O	15.358331	15.999382	8.897880
O	27.631464	13.724213	11.996365
O	19.587173	13.569616	1.927837
O	23.441242	6.542061	11.951263
O	12.848826	12.425023	0.377280
O	19.736515	6.502557	4.435835
O	5.993519	6.372006	4.448397
O	12.827395	4.529751	11.511636
O	10.337471	8.864486	11.485299
O	15.340782	13.921598	4.429726
O	8.558905	2.010562	4.432214
O	17.193506	4.936068	0.358775
O	17.072466	1.871616	4.443201
O	15.328834	8.868499	11.506112
O	8.502532	4.941734	0.344789
O	10.365561	13.866022	4.423769
O	19.003979	5.974493	9.483232
O	17.172430	14.915509	13.510224
O	24.006163	11.004769	2.437169
O	25.858654	17.851151	9.472196
O	28.327457	13.510637	9.456513
O	21.505987	7.482036	13.488853
O	21.520468	15.318585	2.347795
O	14.674052	13.501812	9.458282
O	17.158176	17.856276	9.474813
O	25.845098	14.929832	13.533588
O	19.035563	11.032611	2.375892
O	24.011379	5.977680	9.430943
Al	19.941601	4.998160	5.346316
Si	11.310696	12.939558	0.378353
Si	5.735413	6.902299	2.912692
Si	14.363088	4.739846	12.001837
Si	9.745877	7.437398	11.980228
Si	15.946794	13.883343	2.924843
Si	7.347241	2.412872	5.431383
Si	18.435873	5.987307	0.403075
Si	16.874445	1.491062	2.885019
Si	14.385619	10.100623	11.982153
Si	8.823869	3.350674	0.384531
Si	11.276832	14.769033	5.422617
Si	19.939436	5.139202	8.454628
Si	17.487885	16.508430	13.498981
Si	23.095610	9.764665	1.924004
Si	25.537151	18.341742	10.981965
Si	28.627901	14.764955	8.467712
Si	19.972776	6.940999	13.495276
Si	23.034611	15.097187	1.807666

Si	14.375418	12.965986	10.962046
Si	15.962686	17.441099	8.460739
Si	27.093546	13.888449	13.517482
Si	18.415604	12.449604	1.895066
Si	24.603498	6.019046	10.944150
Si	23.033205	6.920997	13.478243
Si	14.385338	14.766191	8.477383
Si	28.613857	12.961910	10.954301
Si	19.986307	15.137419	1.857681
Si	24.604330	12.422379	1.916191
Si	18.393635	5.999550	10.980581
Si	27.041553	17.448381	8.432434
Si	15.923921	13.876794	13.516736
Si	17.450312	18.349154	10.993125
Si	19.956846	9.800388	1.871932
Si	25.513460	16.519754	13.508097
Si	23.052219	5.110845	8.451962
Si	14.400130	14.802938	5.419695
Si	16.883081	3.338595	0.399761
Si	11.271846	10.099735	11.968509
Si	8.830798	1.537633	2.904530
Si	5.716560	5.026139	5.385704
Si	14.383091	12.951239	0.388874
Si	11.297559	4.741127	12.018024
Si	19.965750	6.937121	2.894668
Si	18.290197	2.370013	5.407034
Si	7.263955	5.988797	0.392648
Si	15.913630	7.435145	11.994361
Si	9.742721	13.852364	2.926690
Rh	20.228529	7.734643	6.249946
Rh	21.478432	9.120249	8.260332
Rh	23.130072	7.939265	6.275210
Rh	21.455168	10.006913	5.492586
C	20.248976	9.704705	9.810383
C	21.558050	10.212280	10.269789

CH₃CH/HRh₄

155

generated by VMD

H	17.590620	11.195684	7.005876
H	18.249559	11.050438	8.647223
H	18.116259	9.597297	7.604565
H	22.618078	9.891887	6.881500
H	20.072533	12.007095	7.186771
O	10.527655	11.732183	0.000782
O	19.998262	5.798827	7.072875
O	23.357306	8.518739	3.204224
O	24.177765	18.884985	11.181741
O	8.664122	7.035352	11.124256
O	17.347980	12.738981	3.092317
O	16.746620	17.332800	7.109777
O	17.963642	7.444150	0.091956
O	15.467622	0.966742	2.908101
O	14.836485	11.384820	11.219375
O	10.542246	3.098593	0.097074
O	11.130939	14.304301	7.098212
O	15.512959	3.030056	0.044124
O	14.862260	14.233224	7.100687
O	11.178830	11.319694	11.034193

O	19.204109	15.978541	2.980036
O	8.670033	12.756631	3.059859
O	17.302788	7.058711	11.096576
O	26.560768	17.256586	7.095291
O	16.770025	12.342942	13.976240
O	19.183121	18.838659	11.177208
O	19.882187	8.468137	2.830822
O	24.115997	16.733572	14.078691
O	6.109531	5.568868	7.060916
O	19.945356	19.258802	13.698153
O	21.758196	4.443707	5.278748
O	21.711206	6.528646	2.580847
O	23.380278	19.274471	13.706671
O	26.736267	7.527089	13.653411
O	16.649500	15.275679	2.642724
O	14.933999	16.326490	5.429798
O	28.370262	10.540125	13.584518
O	26.703602	15.288416	2.605268
O	14.890586	10.453355	13.723664
O	16.653328	7.518424	13.647092
O	28.390516	16.338041	5.377485
O	19.676914	3.610227	8.557438
O	7.953980	12.233357	0.535630
O	6.379303	9.184438	0.638460
O	18.075665	4.538785	11.522725
O	13.018446	15.241029	8.747522
O	11.279039	0.555307	0.442092
O	14.692729	0.496194	0.404357
O	12.946805	13.252892	11.542589
O	6.259986	3.473928	8.709490
O	19.712271	9.474587	0.376723
O	18.010021	12.221966	0.546849
O	7.948084	4.500547	11.538160
O	11.073307	13.364837	2.045152
O	18.915819	3.830834	5.195719
O	6.942691	6.297174	1.995394
O	14.912981	6.321330	12.066861
O	11.073400	6.292108	12.039553
O	14.963871	13.338902	2.033120
O	7.004900	3.862689	5.211329
O	19.196693	6.027295	1.985016
O	17.274942	2.732067	2.035255
O	12.989068	9.640845	12.069485
O	8.739167	2.710403	2.042388
O	12.994964	14.543509	5.196898
O	21.685678	5.254477	9.080673
O	17.414511	17.081123	12.160475
O	21.697393	10.229196	1.944821
O	25.938761	17.122566	12.150176
O	27.888681	16.060892	9.065570
O	19.713381	6.522787	12.128824
O	23.602591	13.489205	2.103849
O	15.437815	13.813157	12.183543
O	15.547479	15.943126	9.049532
O	27.724443	13.637631	12.101315
O	19.713348	13.513886	2.086363
O	23.583067	6.449739	12.090788
O	13.005137	12.434659	0.499808
O	19.829376	6.452291	4.515078
O	6.245596	6.287430	4.543596
O	13.003876	4.522816	11.664351

O	10.508056	8.836266	11.590476
O	15.477121	13.840211	4.584445
O	8.718090	1.949275	4.589361
O	17.323553	4.900421	0.488977
O	17.228779	1.882055	4.582508
O	15.488532	8.874720	11.648347
O	8.675017	4.892568	0.557649
O	10.513849	13.846155	4.580647
O	19.198376	6.035409	9.589314
O	17.367147	14.888156	13.646688
O	24.165760	10.952973	2.605625
O	26.009756	17.845190	9.602151
O	28.483177	13.519205	9.580904
O	21.672167	7.392826	13.675551
O	21.668591	15.248765	2.467330
O	14.818300	13.467396	9.625028
O	17.352446	17.794912	9.616655
O	25.913002	14.891078	13.578236
O	19.229561	10.968652	2.577029
O	24.190964	5.942832	9.559496
Al	20.128681	4.994985	5.485310
Si	11.469185	12.954664	0.528465
Si	5.884498	6.862536	3.079130
Si	14.537055	4.743410	12.154108
Si	9.906150	7.418589	12.106134
Si	16.103601	13.804476	3.089418
Si	7.501624	2.370582	5.584577
Si	18.544230	5.973529	0.501462
Si	17.009554	1.473701	3.035639
Si	14.544079	10.090725	12.165927
Si	8.988930	3.300517	0.551062
Si	11.425733	14.769512	5.563700
Si	20.139391	5.181381	8.568835
Si	17.646994	16.489246	13.651166
Si	23.234922	9.733840	2.087673
Si	25.717951	18.352695	11.112052
Si	28.794119	14.790574	8.617013
Si	20.129034	6.888118	13.651814
Si	23.199419	15.056426	1.965946
Si	14.507255	12.979581	11.142558
Si	16.135662	17.396570	8.617577
Si	27.156147	13.847333	13.601866
Si	18.562992	12.374434	2.068493
Si	24.763140	5.978820	11.075882
Si	23.200026	6.839683	13.620081
Si	14.559848	14.726106	8.626157
Si	28.755007	12.933891	11.065186
Si	20.130623	15.080179	1.989285
Si	24.774719	12.369755	2.075613
Si	18.572916	6.031912	11.083133
Si	27.207365	17.457262	8.570912
Si	16.154123	13.813150	13.640507
Si	17.641130	18.312382	11.125083
Si	20.138563	9.779474	1.914982
Si	25.657598	16.494816	13.617940
Si	23.223507	5.062388	8.587091
Si	14.558078	14.745330	5.579606
Si	17.047781	3.295113	0.528470
Si	11.425694	10.083869	12.069899
Si	8.989412	1.473473	3.065096
Si	5.891196	5.018510	5.530550

Si	14.540603	12.954443	0.514407
Si	11.464963	4.721463	12.146425
Si	20.158436	6.866137	2.988191
Si	18.450397	2.353435	5.557464
Si	7.485507	5.990506	0.498254
Si	16.089584	7.439863	12.116629
Si	9.906941	13.824244	3.077739
Rh	20.458288	7.823317	6.142037
Rh	20.182085	10.144062	5.336617
Rh	21.101990	9.626801	7.691378
Rh	22.470913	9.067310	5.429642
C	19.748659	10.949735	7.083316
C	18.353081	10.672447	7.613470

CH₃CH/H₃Rh₄

157

generated by VMD

H	21.821383	7.941707	8.895916
H	21.420582	10.426916	4.887420
H	23.448542	8.150348	6.381160
H	21.826811	9.431582	9.901452
H	22.576088	10.782187	7.813137
H	23.335888	8.818111	9.200868
H	19.771646	11.006213	6.291240
O	19.301197	16.784307	14.053070
O	20.011637	5.824985	7.034164
O	23.505810	8.582217	3.119650
O	15.598062	3.937614	11.089455
O	8.769138	7.101551	11.063290
O	17.433643	12.796607	2.984006
O	16.824055	17.427303	7.056597
O	26.667595	12.465568	14.051284
O	15.589705	1.014281	2.846170
O	14.942227	11.432008	11.148211
O	10.635835	3.165984	0.029447
O	11.247464	14.347170	7.040791
O	15.613108	3.098423	0.015689
O	14.970447	14.288810	7.042420
O	11.260832	11.400752	11.042872
O	10.653661	1.042534	2.943578
O	8.769401	12.824180	3.007188
O	17.411503	7.109006	11.064934
O	26.681005	17.305180	7.041446
O	16.865124	12.411019	13.957128
O	19.278330	18.906517	11.126969
O	19.965311	8.616020	2.949300
O	24.242954	16.789879	14.072618
O	6.266892	5.588175	7.005598
O	20.054621	19.322035	13.646481
O	21.855820	4.440508	5.324023
O	21.784573	6.691496	2.477888
O	23.499580	19.315237	13.625800
O	26.824142	7.581779	13.601205
O	16.771486	15.345559	2.587231
O	15.040507	16.381357	5.372005
O	28.493248	10.573894	13.582900
O	26.833189	15.343172	2.547427
O	14.992803	10.520768	13.661849
O	16.743801	7.573390	13.609532

O	28.505499	16.380589	5.322213
O	19.801744	3.635475	8.527767
O	8.081478	12.296024	0.478270
O	6.473756	9.288438	0.548133
O	18.163994	4.578981	11.484634
O	13.128181	15.300458	8.689266
O	11.399312	0.634320	0.407861
O	14.779992	0.567385	0.346908
O	13.070477	13.310477	11.494918
O	6.340484	3.523636	8.697078
O	19.834177	9.377072	0.386170
O	18.147432	12.356802	0.432621
O	8.046183	4.567707	11.491570
O	11.179340	13.400532	1.984071
O	19.014761	3.867534	5.120675
O	7.013139	6.320655	1.949983
O	15.011779	6.379686	12.012414
O	11.172956	6.358745	11.990707
O	15.043661	13.444121	1.976831
O	7.104419	3.914550	5.108040
O	19.242271	6.244841	1.932111
O	17.394541	2.784185	1.993981
O	13.091105	9.703321	12.018064
O	8.856110	2.780073	1.998295
O	13.111080	14.588953	5.135016
O	21.782492	5.333250	8.987231
O	17.512154	17.141117	12.099017
O	21.805847	10.273958	1.901427
O	25.990398	17.159504	12.069750
O	27.985395	16.090439	9.015026
O	19.820595	6.557987	12.087326
O	23.708965	13.549331	2.025634
O	15.572809	13.852632	12.112726
O	15.659376	15.997022	8.990667
O	27.860994	13.770390	12.039524
O	19.823587	13.595967	2.046597
O	23.693453	6.534746	12.042358
O	13.117068	12.490748	0.432236
O	19.987963	6.463687	4.466688
O	6.246552	6.313362	4.468711
O	13.099671	4.587556	11.603720
O	10.604936	8.908396	11.559469
O	15.598357	13.901688	4.525461
O	8.830449	2.005032	4.548233
O	17.437441	4.953486	0.472337
O	17.336544	1.909995	4.535952
O	15.592072	8.927709	11.598620
O	8.770418	4.954502	0.502722
O	10.631794	13.889562	4.521615
O	19.297729	6.065909	9.558547
O	17.484604	14.944302	13.582027
O	24.268301	11.023770	2.540238
O	26.114792	17.899153	9.537672
O	28.612358	13.557192	9.523666
O	21.773790	7.476354	13.613715
O	21.786491	15.316431	2.432234
O	14.923820	13.520554	9.561702
O	17.449537	17.866890	9.560957
O	26.064594	14.977612	13.570328
O	19.312778	11.046350	2.442062
O	24.281610	6.003792	9.513345

Al	20.233387	5.013865	5.452031
Si	11.579561	13.007555	0.463909
Si	5.970818	6.952237	3.019088
Si	14.636286	4.801188	12.082282
Si	10.004016	7.483321	12.056507
Si	16.205498	13.879152	3.022902
Si	7.600603	2.433998	5.523300
Si	18.632242	6.050938	0.441112
Si	17.129864	1.517391	2.983466
Si	14.649248	10.148594	12.108435
Si	9.086546	3.364311	0.501981
Si	11.543189	14.812083	5.505506
Si	20.224640	5.215402	8.526337
Si	17.760237	16.545151	13.586277
Si	23.355793	9.788874	2.027230
Si	25.802927	18.405111	11.043452
Si	28.908573	14.833628	8.560207
Si	20.234587	6.956897	13.603022
Si	23.308352	15.116754	1.907160
Si	14.626621	13.029768	11.080241
Si	16.227676	17.461479	8.570284
Si	27.266674	13.891492	13.540116
Si	18.666185	12.470736	1.971538
Si	24.864733	6.045813	11.025373
Si	23.300598	6.916545	13.571191
Si	14.669830	14.781894	8.566793
Si	28.874771	13.008516	11.024170
Si	20.248419	15.160162	1.954584
Si	24.884150	12.431914	2.011483
Si	18.671270	6.070901	11.051229
Si	27.318521	17.493717	8.521254
Si	16.262966	13.877262	13.582576
Si	17.737103	18.378418	11.071680
Si	20.252066	9.837873	1.882432
Si	25.772505	16.574774	13.563911
Si	23.330315	5.114047	8.531325
Si	14.672606	14.799014	5.521079
Si	17.152962	3.350687	0.491766
Si	11.529713	10.147428	12.051226
Si	9.105598	1.543544	3.021213
Si	5.988853	5.052886	5.478431
Si	14.648870	13.018484	0.461488
Si	11.563565	4.786931	12.094026
Si	20.252687	6.977015	2.963435
Si	18.561779	2.390389	5.500463
Si	7.576282	6.050087	0.456887
Si	16.190302	7.494946	12.075093
Si	10.020785	13.872602	3.019820
Rh	20.180294	7.874816	6.186533
Rh	19.862015	9.942189	4.991529
Rh	20.078794	9.904051	7.622416
Rh	22.301479	9.136619	5.928705
C	22.060276	9.797112	7.759976
C	22.255512	8.945984	9.001480

CH₃CH/H₅Rh₄

159

generated by VMD

H	23.630606	9.237699	9.140858
---	-----------	----------	----------

H	21.880995	7.793384	5.908570
H	20.766603	8.794662	7.714444
H	21.231209	10.509754	4.686541
H	23.535908	10.649835	5.031921
H	24.690041	8.801517	7.778107
H	23.472845	11.011936	7.319327
H	23.111485	7.987391	7.971514
H	19.424749	10.898884	6.005746
O	10.577390	11.770225	0.000534
O	20.008249	5.872436	7.109918
O	6.062497	8.620622	3.259949
O	15.542700	3.961571	11.130857
O	8.701716	7.080119	11.126624
O	17.374929	12.799240	3.024985
O	16.767971	17.436319	7.116537
O	17.980059	7.493030	0.046183
O	24.199820	16.036396	2.918204
O	14.880816	11.436963	11.250523
O	10.576722	3.182592	0.093072
O	11.176789	14.388114	7.091849
O	15.556689	3.091659	0.042437
O	14.905475	14.244346	7.104036
O	11.232387	11.365868	11.025738
O	19.245918	16.006653	3.036654
O	8.719263	12.829255	3.049782
O	17.339893	7.091862	11.145856
O	26.639542	17.276405	7.094160
O	16.815201	12.389563	13.981663
O	19.229084	18.886948	11.171651
O	19.893557	8.571117	2.881497
O	15.522578	11.766507	-0.002048
O	6.165129	5.568404	7.079237
O	19.987797	19.300217	13.694565
O	21.766470	4.555417	5.282909
O	21.739098	6.652329	2.641924
O	23.446110	19.289303	13.676573
O	26.779085	7.593559	13.650111
O	16.684408	15.344737	2.650227
O	14.979361	16.354414	5.459429
O	28.402805	10.589981	13.574218
O	26.768847	15.352531	2.590148
O	14.918092	10.511170	13.758096
O	16.683979	7.573890	13.693136
O	28.470619	16.408392	5.352814
O	19.731392	3.657735	8.566062
O	8.024220	12.364871	0.505856
O	6.395736	9.177132	0.659531
O	18.112768	4.564006	11.541972
O	13.080447	15.292171	8.743832
O	11.327702	0.651701	0.494217
O	14.713689	0.569371	0.421990
O	12.989759	13.305879	11.549142
O	6.259896	3.485827	8.752451
O	19.811707	9.434332	0.359479
O	18.078075	12.357827	0.467912
O	8.001781	4.542969	11.574456
O	11.130716	13.412105	2.042529
O	18.956707	3.902197	5.222728
O	6.961054	6.404194	2.017346
O	14.941269	6.383367	12.103501
O	11.109606	6.339849	12.044678

O	14.976547	13.426566	2.030821
O	6.998215	3.891910	5.174859
O	19.247032	6.146396	1.958580
O	17.321726	2.790504	2.034038
O	13.034035	9.687576	12.084966
O	8.820834	2.766107	2.073820
O	13.049690	14.576490	5.193352
O	21.723181	5.316810	9.091882
O	17.477882	17.104698	12.142895
O	21.749140	10.290705	1.934793
O	25.901356	17.153465	12.109874
O	27.950491	16.111786	9.091523
O	19.748453	6.547309	12.166465
O	23.644634	13.552046	2.101116
O	15.478356	13.871758	12.198217
O	15.619057	15.967340	9.032585
O	27.761602	13.692026	12.068962
O	19.775122	13.570023	2.082501
O	23.624853	6.494635	12.101557
O	13.052607	12.473393	0.484452
O	19.792143	6.536268	4.527285
O	6.294729	6.350030	4.572960
O	13.043758	4.580033	11.662024
O	10.554887	8.882700	11.578659
O	15.533573	13.880761	4.581181
O	8.754764	1.999868	4.614172
O	17.366367	4.960203	0.504672
O	17.301067	1.936110	4.579976
O	15.539783	8.930671	11.688769
O	8.692956	4.951181	0.613344
O	10.563124	13.914935	4.576280
O	19.231422	6.070315	9.626381
O	17.374046	14.958031	13.697198
O	24.250658	11.016753	2.524369
O	26.052820	17.901222	9.582288
O	28.549994	13.559786	9.560166
O	21.711292	7.470059	13.672439
O	21.720390	15.309692	2.509508
O	14.864395	13.508821	9.638391
O	17.381041	17.861116	9.618542
O	26.010862	14.971412	13.600387
O	19.219810	11.016874	2.463171
O	24.241131	5.949601	9.575760
Al	20.137787	5.102692	5.511348
Si	11.517330	12.996151	0.524275
Si	5.925006	6.959082	3.128550
Si	14.578909	4.800232	12.141991
Si	9.946533	7.469498	12.103566
Si	16.135780	13.868226	3.076124
Si	7.526077	2.422081	5.591414
Si	18.579752	6.038838	0.484910
Si	17.071486	1.529764	3.035257
Si	14.587354	10.143743	12.196955
Si	9.030034	3.364219	0.581076
Si	11.484640	14.835695	5.554042
Si	20.171663	5.235428	8.591772
Si	17.692785	16.550686	13.650913
Si	23.290705	9.797774	2.092068
Si	25.739887	18.406931	11.088202
Si	28.853882	14.848563	8.615070
Si	20.168158	6.962660	13.673684

Si	23.244101	15.121255	1.982705
Si	14.553032	13.030010	11.158093
Si	16.165409	17.443636	8.627179
Si	27.215689	13.888592	13.578835
Si	18.598244	12.463582	2.007026
Si	24.806997	6.013039	11.093755
Si	23.235144	6.904082	13.624846
Si	14.616187	14.757088	8.625146
Si	28.807158	12.980836	11.049534
Si	20.183884	15.143074	2.027289
Si	24.835587	12.455180	2.046593
Si	18.608387	6.064155	11.119464
Si	27.266275	17.501005	8.574008
Si	16.185509	13.857610	13.659911
Si	17.687481	18.357899	11.129478
Si	20.197884	9.840745	1.881232
Si	25.704012	16.565424	13.604574
Si	23.256723	5.079558	8.609776
Si	14.611077	14.770532	5.586466
Si	17.090668	3.354265	0.529759
Si	11.471616	10.130163	12.064265
Si	9.037770	1.523329	3.093570
Si	5.920082	5.067037	5.534262
Si	14.586117	12.996735	0.514903
Si	11.505447	4.770266	12.145452
Si	20.174242	6.939796	3.021458
Si	18.521292	2.410715	5.556270
Si	7.512287	6.056787	0.530110
Si	16.128384	7.491347	12.159016
Si	9.964273	13.887030	3.069870
Rh	20.338842	7.997037	6.297128
Rh	19.700325	9.897781	4.766462
Rh	21.059710	10.392591	7.088632
Rh	22.535435	9.482224	5.320970
C	22.979645	10.016227	7.254568
C	23.635075	8.946068	8.073033

CH₃CH/H₇Rh₄

161

generated by VMD

H	19.875919	10.287300	8.581349
H	19.189594	10.691845	6.210197
H	23.523027	9.057237	9.139522
H	21.750467	7.786888	5.847010
H	20.671095	8.647909	7.803499
H	21.504574	10.616125	4.910764
H	23.581680	10.655686	5.112920
H	24.662594	9.072333	7.776608
H	23.123528	11.102154	7.593037
H	23.248753	7.978554	7.755575
H	18.138296	9.580141	4.838459
O	10.617151	11.783278	-0.029885
O	20.047731	5.828893	7.097622
O	23.373859	8.622370	3.173920
O	15.562941	3.958337	11.134242
O	8.740906	7.100178	11.114161
O	17.399029	12.818538	3.023082
O	16.791672	17.432367	7.095612
O	17.980072	7.491037	-0.031761

O	24.235401	16.021317	2.903553
O	14.897189	11.448592	11.201750
O	10.602729	3.204114	0.065400
O	11.212833	14.361665	7.081931
O	15.575094	3.120829	0.049241
O	14.934540	14.319960	7.084222
O	11.231061	11.410530	11.082726
O	19.288799	16.072107	3.013726
O	8.728271	12.857206	3.044379
O	17.371843	7.119959	11.113330
O	26.648294	17.328304	7.086561
O	16.833912	12.421733	13.995010
O	19.247528	18.931784	11.157405
O	20.030970	8.632828	2.949134
O	15.557530	11.809691	-0.005920
O	6.162110	5.628557	7.067078
O	20.011602	19.318966	13.683666
O	21.811829	4.578044	5.242710
O	21.737154	6.603216	2.653717
O	23.466553	19.329651	13.672804
O	26.788364	7.606084	13.650443
O	16.738630	15.368289	2.627119
O	14.987666	16.415234	5.414168
O	28.449789	10.589084	13.623726
O	26.815252	15.372000	2.589976
O	14.947133	10.542214	13.717638
O	16.711769	7.597961	13.658372
O	28.474985	16.400578	5.370202
O	19.776443	3.638625	8.580668
O	8.063725	12.363802	0.498272
O	6.410301	9.243094	0.594689
O	18.128202	4.592999	11.539324
O	13.089496	15.318500	8.734797
O	11.351316	0.673287	0.470590
O	14.752511	0.588962	0.400281
O	13.030871	13.331459	11.538813
O	6.304457	3.528730	8.714370
O	19.806009	9.407509	0.406819
O	18.120136	12.370898	0.474366
O	8.013160	4.565666	11.548146
O	11.143704	13.411575	2.025350
O	18.995975	3.891750	5.174538
O	6.958941	6.381173	1.999216
O	14.976213	6.398821	12.068284
O	11.142442	6.373872	12.052644
O	15.005773	13.466808	2.025619
O	7.050624	3.952936	5.185737
O	19.214706	6.264283	1.972357
O	17.341457	2.802575	2.038664
O	13.053176	9.713425	12.071143
O	8.837856	2.798477	2.042133
O	13.075680	14.606911	5.175582
O	21.751511	5.327498	9.096406
O	17.505802	17.137590	12.127263
O	21.779453	10.363237	1.895215
O	25.949678	17.174170	12.113928
O	27.939842	16.096949	9.058517
O	19.780588	6.569087	12.138979
O	23.658566	13.551836	2.062851
O	15.535520	13.871284	12.153195
O	15.624319	16.010658	9.041980

O	27.815868	13.776167	12.073959
O	19.788858	13.617413	2.091111
O	23.661661	6.536980	12.089499
O	13.085468	12.503003	0.478257
O	19.796200	6.549824	4.541224
O	6.308417	6.415756	4.569183
O	13.067533	4.605299	11.651577
O	10.567526	8.920012	11.601432
O	15.569953	13.937405	4.569658
O	8.775825	2.045316	4.584683
O	17.397011	4.975713	0.524650
O	17.310822	1.937151	4.579214
O	15.555577	8.946857	11.654119
O	8.718811	4.975923	0.577297
O	10.596450	13.908911	4.562601
O	19.253017	6.065062	9.604285
O	17.416702	14.972436	13.656192
O	24.282055	11.020147	2.520762
O	26.081070	17.918255	9.584565
O	28.577637	13.565272	9.561869
O	21.739023	7.488476	13.657600
O	21.752234	15.335595	2.480702
O	14.881313	13.534431	9.603624
O	17.414099	17.888014	9.598248
O	26.028557	14.994555	13.610335
O	19.286066	11.064384	2.478775
O	24.265112	5.994259	9.560070
Al	20.174881	5.083850	5.486266
Si	11.546033	13.011072	0.507516
Si	5.925727	6.969117	3.096715
Si	14.603900	4.819824	12.130808
Si	9.971141	7.495888	12.108254
Si	16.172920	13.901632	3.066162
Si	7.551756	2.461814	5.569180
Si	18.593966	6.070042	0.485799
Si	17.098230	1.533629	3.030234
Si	14.609992	10.164489	12.161053
Si	9.055199	3.389506	0.547680
Si	11.508200	14.830154	5.547981
Si	20.204166	5.217919	8.592907
Si	17.729959	16.565630	13.627675
Si	23.306944	9.824359	2.044778
Si	25.767521	18.423231	11.090570
Si	28.870773	14.846231	8.602790
Si	20.195406	6.983810	13.648926
Si	23.273027	15.126507	1.955979
Si	14.586687	13.045540	11.122813
Si	16.196613	17.469017	8.609566
Si	27.229610	13.910035	13.576161
Si	18.632689	12.490437	2.015241
Si	24.836197	6.044863	11.078918
Si	23.265202	6.931507	13.615322
Si	14.631625	14.798693	8.611833
Si	28.838202	13.019722	11.063686
Si	20.210993	15.183370	2.010365
Si	24.858286	12.460720	2.032718
Si	18.633589	6.085314	11.099491
Si	27.283459	17.507301	8.569124
Si	16.217623	13.883400	13.625633
Si	17.711655	18.387997	11.111007
Si	20.236883	9.877169	1.894036

Si	25.738831	16.591927	13.609888
Si	23.283762	5.117233	8.597601
Si	14.635381	14.826316	5.562653
Si	17.110905	3.372653	0.536675
Si	11.492498	10.159028	12.094768
Si	9.071636	1.563682	3.067920
Si	5.952627	5.115366	5.519438
Si	14.615849	13.034848	0.510897
Si	11.530658	4.800272	12.138275
Si	20.193550	6.986155	3.035814
Si	18.534630	2.415266	5.547676
Si	7.531089	6.074432	0.509258
Si	16.156538	7.513587	12.124221
Si	9.989149	13.895537	3.059420
Rh	20.229818	7.939144	6.267162
Rh	19.680143	9.877215	4.920664
Rh	20.822945	10.241049	7.310636
Rh	22.569082	9.515799	5.447459
C	22.766144	10.066414	7.396828
C	23.593679	8.981992	8.039636

CH₃CH/H₉Rh₄

163

generated by VMD

H	20.397972	11.111151	9.083113
H	20.403242	11.127868	4.504437
H	24.640751	9.168739	5.925432
H	20.683594	11.671234	8.475360
H	23.422026	10.530895	9.801415
H	22.274918	7.611194	6.720595
H	20.688950	8.280875	8.150661
H	21.963112	9.979211	4.904442
H	24.343962	9.679843	5.294631
H	24.670877	9.747865	8.801280
H	23.274130	11.451019	7.415170
H	23.178986	8.861138	9.190042
H	20.328524	10.830128	6.302349
O	10.563416	11.759994	-0.136842
O	19.823839	5.686345	7.045324
O	6.167052	8.532993	2.950974
O	15.484576	3.906311	11.024379
O	8.693253	7.095453	11.045083
O	17.341743	12.825846	2.920033
O	16.697847	17.461836	7.014660
O	17.932039	7.429791	-0.172240
O	24.188576	15.972424	2.846388
O	14.827093	11.374023	11.041584
O	10.536800	3.165003	-0.050161
O	11.197538	14.240453	7.009004
O	15.508380	3.120401	0.022078
O	14.874182	14.308131	6.999602
O	11.158444	11.411427	11.131057
O	19.225849	16.035629	2.955055
O	8.653128	12.834067	2.988606
O	17.328695	7.056969	11.078306
O	26.609232	17.373831	7.012184
O	16.737036	12.449563	14.079157
O	19.173805	18.918739	11.103715
O	19.904957	8.675619	3.055703

O	24.156687	16.734613	14.095749
O	6.219185	5.579453	6.989213
O	19.970255	19.297276	13.626336
O	21.753372	4.473129	5.326597
O	21.659178	6.712317	2.474760
O	23.417274	19.249063	13.570497
O	26.702326	7.563481	13.602609
O	16.666044	15.375508	2.533786
O	14.923941	16.403481	5.330884
O	28.440805	10.526757	13.659751
O	26.774162	15.334510	2.515781
O	14.924504	10.552122	13.583695
O	16.627689	7.563872	13.605984
O	28.418236	16.335690	5.360226
O	19.778801	3.516508	8.592052
O	8.016503	12.314801	0.444567
O	6.302855	9.380162	0.412143
O	18.036087	4.513114	11.517658
O	13.021361	15.270867	8.671888
O	11.313373	0.652413	0.420463
O	14.685469	0.582236	0.343675
O	13.021152	13.299289	11.463788
O	6.258595	3.540849	8.708125
O	19.808432	9.213326	0.440312
O	18.030006	12.476646	0.350555
O	7.936866	4.561206	11.436900
O	11.073043	13.348992	1.952518
O	18.960396	3.820415	4.996985
O	6.854739	6.151736	1.946733
O	14.920603	6.340576	11.998185
O	11.081336	6.357547	12.004986
O	14.937316	13.459451	1.944507
O	6.991127	3.941003	5.044806
O	19.101700	6.350566	1.964638
O	17.285070	2.765172	1.999005
O	12.998573	9.678806	12.016824
O	8.815617	2.796061	1.969069
O	13.026379	14.571936	5.081682
O	21.686161	5.323734	8.944044
O	17.412762	17.138748	12.059963
O	21.712488	10.287209	1.925606
O	25.824341	17.082243	12.024668
O	27.833595	15.987002	8.937225
O	19.739780	6.475954	12.077265
O	23.594360	13.522752	1.973778
O	15.554160	13.745037	12.052691
O	15.550641	16.006538	8.951652
O	27.832422	13.831439	12.044592
O	19.752758	13.587975	2.020703
O	23.624846	6.547914	12.042609
O	13.025965	12.455648	0.412039
O	19.925917	6.524690	4.523458
O	6.117618	6.383135	4.479526
O	12.996196	4.575651	11.571481
O	10.500893	8.916499	11.598151
O	15.526106	13.931868	4.484833
O	8.717354	2.021874	4.513222
O	17.366352	4.945388	0.509398
O	17.260054	1.854496	4.531466
O	15.493309	8.885063	11.567170
O	8.685365	4.956100	0.448492

O	10.543391	13.862730	4.489886
O	19.175730	5.942930	9.568915
O	17.376997	14.942707	13.546373
O	24.201992	11.000450	2.477483
O	26.036001	17.859043	9.518822
O	28.534241	13.497568	9.517683
O	21.679451	7.476888	13.579372
O	21.701117	15.315088	2.437234
O	14.852499	13.512117	9.510189
O	17.369753	17.853598	9.520420
O	26.070816	14.996303	13.644590
O	19.153910	11.038519	2.274973
O	24.165901	6.044806	9.499290
Al	20.110147	5.013683	5.412837
Si	11.489458	12.974000	0.432240
Si	5.864263	6.924466	2.974104
Si	14.539233	4.763005	12.040275
Si	9.907300	7.478438	12.066378
Si	16.113113	13.902649	2.973037
Si	7.482647	2.459200	5.477239
Si	18.551163	6.055162	0.462838
Si	17.049828	1.483222	2.973597
Si	14.560495	10.122440	12.052482
Si	9.001060	3.364534	0.460877
Si	11.462644	14.764294	5.485008
Si	20.122957	5.112521	8.543286
Si	17.669559	16.539688	13.545155
Si	23.262882	9.791292	1.943344
Si	25.684278	18.352333	11.019343
Si	28.815088	14.759649	8.527855
Si	20.145557	6.942171	13.575130
Si	23.214481	15.099047	1.893536
Si	14.562363	12.983695	11.017535
Si	16.130789	17.469040	8.539958
Si	27.230621	13.869010	13.550449
Si	18.563656	12.499153	1.893475
Si	24.774454	6.055345	11.005013
Si	23.210670	6.929999	13.565555
Si	14.572907	14.780241	8.529792
Si	28.810568	13.008540	11.038951
Si	20.162571	15.156981	1.957720
Si	24.790972	12.426911	1.969252
Si	18.567316	5.993474	11.065483
Si	27.236153	17.439455	8.505951
Si	16.153873	13.876884	13.553834
Si	17.639223	18.375975	11.032655
Si	20.160419	9.835679	1.900081
Si	25.685398	16.571276	13.555938
Si	23.241850	5.124052	8.517186
Si	14.581767	14.813080	5.475991
Si	17.052801	3.348488	0.502765
Si	11.444381	10.137228	12.106937
Si	9.015965	1.551482	2.992772
Si	5.888070	5.078698	5.457342
Si	14.559107	12.980695	0.439930
Si	11.466988	4.781343	12.079025
Si	20.146116	7.016589	3.013870
Si	18.490953	2.372849	5.469468
Si	7.468952	6.028483	0.449911
Si	16.094530	7.459261	12.064773
Si	9.929539	13.852506	2.988864

Rh	20.662256	7.666997	6.675795
Rh	20.343355	9.682246	5.094338
Rh	20.988997	10.124906	7.749499
Rh	22.895926	9.197041	6.149628
C	22.946533	10.430647	7.687553
C	23.580593	9.857888	8.941735

CH₂CH/H₂Rh₄

155

generated by VMD

H	20.863852	8.571006	7.738214
H	22.078714	7.836224	5.945327
H	25.100475	9.442084	7.281412
H	23.495802	11.359751	6.884325
H	23.674940	8.291554	7.595516
O	10.579896	11.768912	0.002014
O	19.993227	5.771677	7.132394
O	23.482903	8.608994	3.268223
O	15.531038	3.935888	11.146025
O	8.711949	7.077598	11.131475
O	17.376324	12.795125	3.029533
O	16.780922	17.355787	7.139022
O	17.974674	7.462410	0.024675
O	24.202229	16.029837	2.925220
O	14.876174	11.428569	11.239478
O	10.563699	3.187315	0.074516
O	11.170399	14.322961	7.103154
O	15.549369	3.105607	0.081628
O	14.919856	14.274024	7.122764
O	11.202597	11.367820	11.092138
O	19.260059	16.040359	3.046675
O	8.708101	12.823044	3.068511
O	17.342657	7.077843	11.150888
O	26.637785	17.293175	7.111253
O	16.807098	12.380677	13.987336
O	19.208431	18.901024	11.191420
O	19.804081	8.600945	2.955688
O	15.525667	11.772289	0.028092
O	6.129571	5.622891	7.087974
O	19.989347	19.299526	13.710523
O	21.786736	4.511063	5.290607
O	21.720425	6.734470	2.661800
O	23.438637	19.290997	13.687116
O	26.756729	7.566741	13.671366
O	16.703638	15.343946	2.665413
O	14.974922	16.358194	5.444376
O	28.438898	10.563898	13.637730
O	26.772669	15.338640	2.602678
O	14.914694	10.497852	13.740547
O	16.669382	7.570095	13.691051
O	28.467087	16.369164	5.397058
O	19.759815	3.587523	8.631630
O	8.008715	12.271626	0.545906
O	6.456934	9.237440	0.674027
O	18.095306	4.548486	11.576898
O	13.051595	15.271702	8.749835
O	11.336980	0.671059	0.501625
O	14.703867	0.585252	0.423787
O	12.986371	13.295597	11.566284

O	6.290650	3.516747	8.720366
O	19.785141	9.398870	0.407361
O	18.087858	12.350383	0.477364
O	7.971916	4.551458	11.567978
O	11.121799	13.393513	2.051858
O	18.971140	3.855203	5.186955
O	6.921154	6.381875	1.998212
O	14.938452	6.370959	12.094824
O	11.113594	6.345138	12.069705
O	14.975251	13.444605	2.047483
O	7.027843	3.896873	5.260494
O	19.229738	6.184346	1.997982
O	17.329466	2.781673	2.063425
O	13.030668	9.676612	12.077281
O	8.817554	2.766232	2.069271
O	13.054559	14.554549	5.216758
O	21.720396	5.291991	9.121957
O	17.455517	17.129107	12.173155
O	21.746910	10.210193	1.949965
O	25.893810	17.130075	12.127660
O	27.902370	16.049566	9.090236
O	19.753288	6.532919	12.165808
O	23.649548	13.559419	2.083345
O	15.470660	13.860822	12.209118
O	15.571133	15.989284	9.084011
O	27.766129	13.725421	12.089984
O	19.763130	13.603724	2.089584
O	23.632046	6.529302	12.114191
O	13.054745	12.473717	0.503088
O	19.812059	6.500538	4.566517
O	6.304712	6.304049	4.550647
O	13.034353	4.572542	11.669178
O	10.540470	8.887139	11.626654
O	15.544996	13.881770	4.597893
O	8.757696	2.012052	4.620192
O	17.386713	4.945726	0.538319
O	17.297722	1.894045	4.605979
O	15.535987	8.917592	11.671482
O	8.683810	4.947226	0.610403
O	10.568345	13.887607	4.583406
O	19.217192	6.015788	9.638964
O	17.423889	14.926612	13.646239
O	24.186970	11.040995	2.622694
O	26.050056	17.883558	9.605067
O	28.541492	13.519595	9.579584
O	21.707609	7.493210	13.669998
O	21.725683	15.316681	2.519371
O	14.854402	13.510936	9.648000
O	17.377722	17.851681	9.638391
O	25.996103	14.958675	13.636044
O	19.274841	11.060742	2.481781
O	24.225033	5.986551	9.581183
Al	20.153990	5.039298	5.520232
Si	11.518359	12.991068	0.533683
Si	5.927095	6.959853	3.134525
Si	14.571065	4.789529	12.148039
Si	9.940210	7.464839	12.128590
Si	16.143936	13.871889	3.090136
Si	7.535185	2.407461	5.615531
Si	18.590914	6.032044	0.515034
Si	17.074999	1.513733	3.053391

Si	14.585052	10.131425	12.181264
Si	9.020176	3.361392	0.574498
Si	11.485973	14.795888	5.574589
Si	20.171370	5.172819	8.625489
Si	17.697771	16.528254	13.657992
Si	23.304276	9.787455	2.116385
Si	25.731218	18.387268	11.110322
Si	28.832214	14.802896	8.624329
Si	20.168501	6.972381	13.668415
Si	23.244318	15.127856	1.981399
Si	14.547294	13.023038	11.165153
Si	16.164652	17.437273	8.642760
Si	27.202337	13.877712	13.599432
Si	18.609285	12.476062	2.014665
Si	24.799129	6.033031	11.097594
Si	23.232059	6.927947	13.636740
Si	14.598556	14.765474	8.644812
Si	28.797886	12.977680	11.082541
Si	20.187910	15.169106	2.036022
Si	24.818321	12.438575	2.077171
Si	18.602810	6.039923	11.133726
Si	27.260105	17.466873	8.599751
Si	16.206522	13.856642	13.655972
Si	17.668615	18.368092	11.145765
Si	20.177101	9.829515	1.919464
Si	25.702215	16.555904	13.628549
Si	23.252180	5.104758	8.612913
Si	14.616559	14.773433	5.597924
Si	17.090361	3.345708	0.559721
Si	11.470352	10.123691	12.110049
Si	9.044500	1.535251	3.101056
Si	5.924364	5.064809	5.555325
Si	14.586302	13.003754	0.534023
Si	11.499659	4.772135	12.161028
Si	20.155016	6.972695	3.066476
Si	18.521658	2.379955	5.571770
Si	7.498463	6.045716	0.522368
Si	16.123926	7.480537	12.153291
Si	9.961196	13.871148	3.081312
Rh	20.440842	7.838106	6.289888
Rh	20.172577	9.789227	4.892531
Rh	21.129944	10.233864	7.202163
Rh	22.588509	9.370549	5.349994
C	23.141068	10.319338	7.009565
C	24.020332	9.263770	7.241590

CH₂CH/H₄Rh₄

157

generated by VMD

H	20.703308	8.556520	7.758353
H	21.361956	10.497649	4.640012
H	23.704683	8.324077	6.036554
H	23.337175	10.541073	9.167366
H	23.616274	11.259397	6.720277
H	23.157402	8.779342	8.623839
H	19.791206	10.782043	6.297888
O	19.245016	16.767069	14.094322
O	20.057970	5.822411	7.082072
O	23.404823	8.568939	3.248614

O	15.546823	3.920766	11.130930
O	8.720745	7.077209	11.089345
O	17.388910	12.771161	3.020971
O	16.818064	17.364983	7.106181
O	17.945202	7.437767	-0.051562
O	24.207842	16.013597	2.880206
O	14.904562	11.424916	11.220111
O	10.585588	3.144988	0.064674
O	11.188567	14.351013	7.083444
O	15.560316	3.063365	0.052495
O	14.920502	14.248475	7.098789
O	11.202157	11.370234	11.063136
O	10.599402	0.997867	2.990416
O	8.714365	12.795679	3.072638
O	17.352449	7.070502	11.107822
O	26.621988	17.241343	7.082006
O	16.834021	12.364580	13.947739
O	19.227940	18.863390	11.192186
O	19.912867	8.578315	2.974122
O	24.183275	16.758278	14.111552
O	6.137242	5.591032	7.041457
O	20.005064	19.306799	13.704088
O	21.786930	4.424216	5.293426
O	21.732807	6.652709	2.533626
O	23.452545	19.286734	13.672077
O	26.772558	7.557610	13.626866
O	16.709270	15.318042	2.644743
O	15.009910	16.337885	5.431252
O	28.431656	10.548805	13.603285
O	26.775017	15.310857	2.586141
O	14.942371	10.479050	13.716655
O	16.689789	7.560628	13.649865
O	28.462658	16.374363	5.349188
O	19.735579	3.616664	8.526264
O	8.022127	12.240852	0.549747
O	6.481769	9.205382	0.672203
O	18.114542	4.545366	11.532736
O	13.078323	15.276089	8.736457
O	11.338666	0.612884	0.449166
O	14.731281	0.532364	0.380932
O	13.001528	13.279577	11.538989
O	6.327106	3.507748	8.700614
O	19.783569	9.327309	0.412645
O	18.083286	12.344921	0.461778
O	7.993527	4.546917	11.514624
O	11.120288	13.364895	2.035132
O	18.945686	3.865083	5.211639
O	6.969856	6.376702	1.968987
O	14.953214	6.358355	12.065507
O	11.120146	6.326728	12.025678
O	14.993145	13.410215	2.022306
O	7.046449	3.874872	5.210926
O	19.196281	6.210226	1.949630
O	17.352814	2.753836	2.021228
O	13.042602	9.690383	12.052649
O	8.812517	2.740820	2.036085
O	13.064152	14.569220	5.188486
O	21.735720	5.261283	9.084231
O	17.434010	17.124712	12.161947
O	21.755779	10.227408	1.906008
O	25.925337	17.125168	12.099488

O	27.941280	16.078424	9.074991
O	19.765305	6.527758	12.125461
O	23.658449	13.525504	2.077608
O	15.476006	13.858168	12.198136
O	15.605990	15.975865	9.036574
O	27.789513	13.735135	12.067124
O	19.779427	13.561319	2.073461
O	23.644543	6.506319	12.074800
O	13.061815	12.467443	0.479213
O	19.892212	6.463069	4.502547
O	6.241945	6.250866	4.491398
O	13.048323	4.556555	11.655936
O	10.564117	8.874976	11.583016
O	15.545702	13.857125	4.574731
O	8.785989	1.991165	4.587183
O	17.378784	4.923739	0.501157
O	17.293926	1.897429	4.566004
O	15.540028	8.905407	11.636834
O	8.716743	4.928021	0.576878
O	10.582654	13.877713	4.569686
O	19.236143	6.021487	9.594765
O	17.438786	14.913903	13.627237
O	24.197607	11.002737	2.625989
O	26.060755	17.882723	9.572380
O	28.555817	13.534887	9.556314
O	21.722452	7.440828	13.651747
O	21.734674	15.291031	2.466450
O	14.876980	13.509233	9.630896
O	17.412336	17.824425	9.614720
O	26.013674	14.954512	13.614223
O	19.255339	11.013259	2.449664
O	24.231808	5.990396	9.536701
Al	20.172855	5.019740	5.484787
Si	11.525352	12.985768	0.512918
Si	5.915569	6.914412	3.068193
Si	14.585708	4.777596	12.129898
Si	9.954874	7.455252	12.083723
Si	16.153318	13.845059	3.070833
Si	7.566226	2.392791	5.584080
Si	18.572504	6.021040	0.464551
Si	17.080633	1.494797	3.017566
Si	14.602151	10.125824	12.155557
Si	9.038337	3.337825	0.544855
Si	11.495663	14.805824	5.548009
Si	20.190098	5.187613	8.576167
Si	17.702892	16.517359	13.640037
Si	23.300779	9.764045	2.102140
Si	25.748907	18.380281	11.081280
Si	28.855896	14.820463	8.606145
Si	20.180408	6.931266	13.638364
Si	23.257742	15.093314	1.944610
Si	14.565317	13.017031	11.145368
Si	16.199965	17.427820	8.610267
Si	27.205202	13.858249	13.571208
Si	18.613190	12.444810	1.998178
Si	24.813377	6.026554	11.050911
Si	23.248659	6.882617	13.603892
Si	14.619792	14.756743	8.619540
Si	28.810507	12.978572	11.054751
Si	20.196066	15.129007	1.990742
Si	24.827787	12.403513	2.079610

Si	18.616932	6.038403	11.089840
Si	27.261749	17.468227	8.556337
Si	16.223402	13.841917	13.638972
Si	17.683245	18.349037	11.123344
Si	20.195276	9.803212	1.905612
Si	25.712839	16.550066	13.598250
Si	23.271326	5.089935	8.572812
Si	14.628514	14.759051	5.575667
Si	17.100843	3.320107	0.520659
Si	11.477616	10.121122	12.075051
Si	9.055273	1.510281	3.065632
Si	5.917767	5.015739	5.518188
Si	14.595811	12.989861	0.505954
Si	11.512854	4.757509	12.146197
Si	20.189013	6.934720	3.000560
Si	18.509764	2.372147	5.546522
Si	7.532864	6.028986	0.488373
Si	16.136223	7.471159	12.115591
Si	9.966553	13.846582	3.071274
Rh	20.470490	7.837390	6.302522
Rh	19.924738	9.807012	4.973485
Rh	21.233849	10.221871	7.331347
Rh	22.541361	9.207191	5.471628
C	23.210262	10.276879	7.019160
C	23.082020	9.837289	8.364373

CH₂CH/H₆Rh₄

159

generated by VMD

H	21.411959	10.359236	9.130548
H	19.112303	9.021853	5.713502
H	21.361433	10.491389	4.693700
H	21.726162	9.525769	9.278944
H	20.099056	8.548059	7.794539
H	22.652433	11.893858	6.556113
H	24.110952	9.112924	6.848103
H	23.838800	11.414711	7.895034
H	20.413202	10.895867	6.976542
O	19.228363	16.747257	14.117360
O	19.915430	5.801695	7.088148
O	6.000607	8.543657	3.149955
O	24.198982	18.902414	11.171850
O	8.694250	7.069190	11.136574
O	17.368927	12.761278	3.081713
O	16.752146	17.356943	7.112936
O	17.983376	7.454741	0.064207
O	24.182291	15.984393	2.928276
O	14.861627	11.403384	11.201406
O	10.562004	3.114387	0.085289
O	11.166533	14.296081	7.100139
O	15.540352	3.061824	0.068740
O	14.904450	14.304348	7.103375
O	11.201372	11.356256	11.082161
O	19.246540	16.009050	3.011563
O	8.702117	12.783834	3.066316
O	17.349806	7.082548	11.140933
O	26.603783	17.328999	7.092350
O	16.820578	12.375294	13.974658
O	19.208328	18.878508	11.174300

O	20.032131	8.509647	2.876005
O	15.504890	11.762852	-0.017826
O	6.187207	5.650753	7.066797
O	19.978561	19.281111	13.698651
O	21.796501	4.508748	5.351056
O	21.746063	6.492781	2.576032
O	23.417131	19.292694	13.700315
O	26.759245	7.546194	13.669040
O	16.698801	15.309332	2.647086
O	14.949856	16.375553	5.405150
O	28.418465	10.550300	13.628939
O	26.751760	15.310796	2.607498
O	14.931788	10.497514	13.716556
O	16.656704	7.542551	13.677362
O	28.430346	16.351532	5.405181
O	19.743446	3.608820	8.586382
O	8.011538	12.281020	0.528647
O	6.401920	9.206773	0.598959
O	18.088013	4.551950	11.565054
O	13.034574	15.268843	8.748880
O	11.317536	0.581727	0.475841
O	14.721113	0.525381	0.425407
O	12.990238	13.282389	11.545553
O	6.280005	3.533167	8.696841
O	19.741129	9.461531	0.416083
O	18.061399	12.263975	0.534650
O	7.973048	4.534697	11.547822
O	11.104362	13.374042	2.041955
O	18.979856	3.842861	5.144219
O	6.990118	6.327455	1.990599
O	14.944963	6.342042	12.065752
O	11.103583	6.323815	12.052232
O	14.986014	13.394814	2.041747
O	7.037822	3.910857	5.217790
O	19.200287	6.103714	2.010415
O	17.305611	2.750214	2.052202
O	13.022607	9.667738	12.083685
O	8.789703	2.746583	2.057048
O	13.033468	14.563105	5.200154
O	21.706160	5.320639	9.032858
O	17.449883	17.111231	12.149996
O	21.740719	10.314101	1.896481
O	25.945627	17.127542	12.147577
O	27.892582	16.062075	9.047947
O	19.763411	6.507908	12.150364
O	23.634487	13.499491	2.102006
O	15.495925	13.825553	12.157102
O	15.547322	16.000956	9.075773
O	27.772905	13.696144	12.114863
O	19.744818	13.538630	2.115478
O	23.615303	6.483948	12.115088
O	13.043791	12.459189	0.502890
O	19.892271	6.507822	4.538008
O	6.268217	6.336747	4.540416
O	13.031160	4.552079	11.663828
O	10.536386	8.870079	11.619351
O	15.522701	13.885086	4.591687
O	8.746084	1.990169	4.599102
O	17.360723	4.920873	0.515430
O	17.272842	1.892923	4.593797
O	15.520054	8.895375	11.658694

O	8.713654	4.918945	0.553592
O	10.555804	13.864839	4.579605
O	19.211798	6.022958	9.621876
O	17.399895	14.922304	13.639773
O	24.228420	10.962159	2.569549
O	26.053341	17.878881	9.608455
O	28.513563	13.533214	9.591909
O	21.701769	7.421409	13.699306
O	21.708315	15.261161	2.498137
O	14.842399	13.500257	9.611588
O	17.368837	17.847271	9.611871
O	25.950838	14.918003	13.604375
O	19.244184	10.987826	2.572690
O	24.207571	5.990280	9.580861
Al	20.153387	5.031302	5.493121
Si	11.506446	12.973714	0.524228
Si	5.914363	6.877510	3.059889
Si	14.566678	4.764816	12.149585
Si	9.934793	7.447893	12.122989
Si	16.137857	13.843345	3.092356
Si	7.521611	2.410968	5.583807
Si	18.573078	6.001802	0.517258
Si	17.050694	1.486278	3.047181
Si	14.579254	10.118316	12.163373
Si	9.016586	3.324427	0.557446
Si	11.464514	14.780904	5.571364
Si	20.146078	5.196170	8.583233
Si	17.688841	16.520779	13.640285
Si	23.265484	9.775936	2.041147
Si	25.740435	18.370167	11.119947
Si	28.816713	14.799182	8.617127
Si	20.163334	6.903162	13.669140
Si	23.235039	15.069815	1.982479
Si	14.545656	13.000761	11.127636
Si	16.146473	17.443491	8.621530
Si	27.190382	13.870460	13.615634
Si	18.593365	12.401258	2.066308
Si	24.789145	6.015890	11.093679
Si	23.229525	6.870349	13.643722
Si	14.582636	14.772240	8.631025
Si	28.792843	12.968423	11.084219
Si	20.168388	15.104011	2.021051
Si	24.820749	12.394262	2.066485
Si	18.602524	6.037968	11.118759
Si	27.245861	17.481720	8.575324
Si	16.197086	13.837885	13.619554
Si	17.666967	18.350918	11.123233
Si	20.193171	9.819261	1.936533
Si	25.693089	16.521259	13.629362
Si	23.254778	5.124835	8.582660
Si	14.594060	14.790859	5.577392
Si	17.077726	3.317555	0.548235
Si	11.460642	10.111840	12.103938
Si	9.032141	1.508506	3.079719
Si	5.939389	5.076271	5.548466
Si	14.576394	12.985963	0.524976
Si	11.494026	4.751668	12.148829
Si	20.209938	6.894173	3.000952
Si	18.499056	2.381427	5.554197
Si	7.531271	6.022664	0.489777
Si	16.118601	7.462633	12.136410

Si	9.946184	13.842936	3.078195
Rh	20.128754	7.847902	6.301894
Rh	19.850161	10.538483	5.480228
Rh	21.547586	9.668963	7.578139
Rh	22.165499	9.088439	5.140659
C	23.309135	9.809457	6.542288
C	23.146891	11.092610	7.109335

CH₂CH/H₈Rh₄

161

generated by VMD

H	21.474514	8.210760	5.957335
H	21.213112	12.032765	4.988760
H	20.787540	10.258337	9.090021
H	19.395166	9.196231	5.378497
H	22.217363	10.786839	4.922949
H	21.063482	9.396343	9.317722
H	19.781704	8.736854	7.619717
H	22.774191	11.898734	7.311789
H	24.072432	9.059806	7.697828
H	23.433414	11.194002	8.894435
H	20.724846	10.977075	6.770822
O	10.567784	11.738201	-0.003320
O	19.967520	5.822716	7.079529
O	23.373947	8.554912	3.207492
O	24.217154	18.911081	11.168386
O	8.697099	7.049610	11.120090
O	17.394056	12.756992	3.074044
O	16.766991	17.369364	7.103093
O	18.014000	7.464644	0.102487
O	24.179737	16.005024	2.912645
O	14.872898	11.399947	11.221781
O	10.573833	3.131043	0.084791
O	11.170297	14.324464	7.084815
O	15.553192	3.048551	0.034318
O	14.896875	14.254255	7.095558
O	11.230976	11.319283	10.993314
O	19.240017	15.973371	3.004515
O	8.710240	12.772733	3.052149
O	17.337946	7.060580	11.121148
O	26.616423	17.286116	7.080831
O	16.807407	12.353294	13.968240
O	19.220505	18.847334	11.165537
O	19.925713	8.464190	2.757393
O	24.153168	16.734514	14.077641
O	6.175285	5.607284	7.064507
O	19.985231	19.262459	13.686753
O	21.791403	4.544312	5.282005
O	21.747900	6.526014	2.634372
O	23.420343	19.274950	13.697809
O	26.779701	7.547063	13.641888
O	16.683958	15.295413	2.640619
O	14.964486	16.344326	5.422644
O	28.400002	10.562466	13.545841
O	26.740925	15.305202	2.589721
O	14.915680	10.474085	13.729468
O	16.681427	7.527409	13.666997
O	28.447201	16.359537	5.366242
O	19.728868	3.622501	8.559875

O	7.997043	12.258488	0.523577
O	6.414970	9.182921	0.633845
O	18.116495	4.540860	11.536637
O	13.052798	15.262292	8.740983
O	11.318604	0.594622	0.462930
O	14.718916	0.523341	0.412181
O	12.977457	13.263218	11.534541
O	6.277484	3.495922	8.702712
O	19.761599	9.507326	0.323490
O	18.047508	12.235456	0.525750
O	7.987353	4.515504	11.545532
O	11.111547	13.380110	2.035371
O	18.977995	3.853198	5.174870
O	6.972315	6.335360	1.996346
O	14.940276	6.338428	12.078395
O	11.108225	6.298277	12.030761
O	15.006168	13.349855	2.027843
O	7.021911	3.884594	5.196502
O	19.260948	6.002649	1.955727
O	17.315023	2.750643	2.022045
O	13.030752	9.646808	12.062103
O	8.799304	2.724204	2.050214
O	13.037937	14.550843	5.183935
O	21.712738	5.296030	9.049648
O	17.456142	17.090288	12.151172
O	21.731323	10.250488	1.922886
O	25.958260	17.125111	12.131255
O	27.919703	16.073828	9.056531
O	19.754465	6.526540	12.139272
O	23.646223	13.511506	2.099538
O	15.471167	13.829280	12.177522
O	15.576520	15.966148	9.043552
O	27.741997	13.618368	12.073982
O	19.757153	13.524257	2.061342
O	23.614674	6.461012	12.093525
O	13.045132	12.440479	0.499044
O	19.794571	6.494122	4.495413
O	6.311884	6.347458	4.563972
O	13.042227	4.533412	11.655545
O	10.552753	8.840608	11.565255
O	15.522421	13.857594	4.578469
O	8.748808	1.973242	4.590216
O	17.360559	4.918510	0.469036
O	17.287186	1.906711	4.569493
O	15.534748	8.890563	11.664465
O	8.696716	4.906467	0.572850
O	10.551788	13.870002	4.569591
O	19.224621	6.039615	9.604850
O	17.399866	14.902864	13.646056
O	24.207504	10.971659	2.581776
O	26.050613	17.871254	9.589581
O	28.521626	13.530457	9.561252
O	21.707890	7.424468	13.673637
O	21.707861	15.261118	2.482743
O	14.847807	13.486222	9.620446
O	17.373802	17.823822	9.610041
O	25.948717	14.897625	13.557485
O	19.265812	10.973526	2.541328
O	24.222759	5.957004	9.565459
Al	20.150181	5.054963	5.481966
Si	11.510109	12.961849	0.521667

Si	5.922692	6.891086	3.090126
Si	14.574109	4.756652	12.149805
Si	9.946455	7.429449	12.094820
Si	16.147234	13.818402	3.082613
Si	7.526602	2.393642	5.576681
Si	18.588047	5.983675	0.481180
Si	17.053600	1.494330	3.026795
Si	14.582940	10.105351	12.168271
Si	9.024242	3.316768	0.557657
Si	11.470990	14.788022	5.551111
Si	20.156815	5.203630	8.567584
Si	17.687016	16.503019	13.644241
Si	23.267862	9.760616	2.068169
Si	25.753826	18.367010	11.103512
Si	28.830502	14.808410	8.604869
Si	20.165514	6.915215	13.657352
Si	23.236639	15.078249	1.973592
Si	14.540711	12.993514	11.136690
Si	16.158125	17.421108	8.611770
Si	27.194792	13.857471	13.578263
Si	18.605143	12.387090	2.047831
Si	24.796810	5.991139	11.082150
Si	23.231821	6.861156	13.620739
Si	14.593735	14.744609	8.620458
Si	28.791849	12.936106	11.041891
Si	20.170717	15.092696	2.001047
Si	24.816833	12.392842	2.063417
Si	18.608700	6.036807	11.099814
Si	27.251177	17.477417	8.562756
Si	16.191425	13.823772	13.631893
Si	17.676264	18.326777	11.120461
Si	20.173426	9.790886	1.870384
Si	25.692179	16.501875	13.604277
Si	23.254398	5.087245	8.584605
Si	14.599185	14.758759	5.571720
Si	17.087990	3.313044	0.515895
Si	11.468655	10.091430	12.040947
Si	9.030385	1.483680	3.071846
Si	5.941795	5.063573	5.533479
Si	14.581334	12.958944	0.511337
Si	11.503296	4.728187	12.136368
Si	20.178759	6.873056	2.971455
Si	18.509626	2.379276	5.543315
Si	7.514283	6.009218	0.499663
Si	16.123579	7.450874	12.133371
Si	9.945682	13.842959	3.066769
Rh	19.877052	7.889557	6.207590
Rh	20.589712	10.595284	5.190066
Rh	21.400036	9.608923	7.680978
Rh	22.866472	9.228019	5.461921
C	23.403090	9.812036	7.231971
C	23.061972	11.012804	7.881346

CH₂CH/H₁₀Rh₄

163

generated by VMD

H	24.200056	10.516150	5.340309
H	19.583515	11.082756	5.300259
H	21.460573	8.351315	5.858059

H	21.210512	11.595591	4.760666
H	21.451384	9.663747	9.238469
H	19.469721	9.179665	5.948364
H	22.579836	10.441096	5.119193
H	22.285143	8.189436	8.790989
H	20.214222	8.393047	7.942231
H	23.119940	11.563015	7.567951
H	24.498425	8.767457	7.798224
H	23.774855	10.756603	9.099212
H	21.030884	10.922935	6.684785
O	19.190182	16.757519	14.051414
O	19.875259	5.636445	7.094574
O	23.399475	8.569371	3.085476
O	24.131962	18.923374	11.109464
O	8.676891	7.093220	11.110147
O	17.315844	12.833591	3.003496
O	16.700829	17.399632	7.072723
O	17.910881	7.440176	-0.114625
O	24.160414	15.970147	2.905489
O	14.822675	11.402505	11.101994
O	10.507456	3.174087	-0.005210
O	11.173176	14.224653	7.064734
O	15.484619	3.125658	0.075991
O	14.847898	14.376222	7.064172
O	11.111591	11.414946	11.172701
O	19.198526	16.056528	3.008356
O	8.617089	12.846229	3.048024
O	17.304079	7.074754	11.121243
O	26.582911	17.426207	7.070480
O	16.746044	12.440218	14.065705
O	19.142120	18.938654	11.157458
O	19.984293	8.670855	3.075444
O	15.471828	11.765563	0.013392
O	6.076071	5.710058	7.048663
O	19.937609	19.298109	13.681491
O	21.753904	4.569167	5.237433
O	21.628817	6.617968	2.642447
O	23.376520	19.280270	13.649234
O	26.684181	7.572736	13.664716
O	16.643639	15.381093	2.595896
O	14.884558	16.448940	5.365041
O	28.417097	10.535089	13.701920
O	26.748430	15.345038	2.584043
O	14.901299	10.550495	13.634273
O	16.595848	7.588157	13.645526
O	28.373365	16.327579	5.435463
O	19.757690	3.514347	8.689799
O	7.997067	12.365914	0.490403
O	6.272276	9.272081	0.517090
O	18.016081	4.535771	11.561343
O	12.969559	15.294061	8.731668
O	11.270844	0.660431	0.470269
O	14.668535	0.586446	0.398311
O	12.979731	13.290803	11.519653
O	6.261070	3.596617	8.664068
O	19.756605	9.277175	0.481000
O	18.011887	12.437190	0.444559
O	7.898407	4.566043	11.495375
O	11.034847	13.351541	2.006360
O	18.962843	3.805657	5.025035
O	6.836195	6.243786	1.969776

O	14.895360	6.352214	12.046692
O	11.066910	6.366735	12.071899
O	14.913811	13.464616	2.016298
O	6.995759	3.993691	5.206710
O	19.093975	6.354544	2.001452
O	17.252279	2.771804	2.058083
O	12.976084	9.706781	12.051993
O	8.778629	2.800589	2.010467
O	12.999164	14.596028	5.140059
O	21.661922	5.317845	9.068979
O	17.391523	17.144707	12.107395
O	21.687510	10.339220	1.946219
O	25.828224	17.106956	12.102149
O	27.776470	15.984385	8.972673
O	19.718082	6.489987	12.119536
O	23.552792	13.523699	2.032811
O	15.497156	13.789079	12.113303
O	15.481283	16.059029	9.044646
O	27.793854	13.837805	12.095257
O	19.718237	13.601658	2.084333
O	23.596985	6.556067	12.097733
O	12.998750	12.466829	0.478361
O	19.735252	6.526640	4.570407
O	6.203810	6.452119	4.554595
O	12.971982	4.579172	11.633942
O	10.483437	8.915734	11.649673
O	15.499858	13.963926	4.555028
O	8.680362	2.066002	4.552248
O	17.343687	4.952501	0.563057
O	17.222898	1.868367	4.593711
O	15.463982	8.898517	11.602236
O	8.658321	4.964405	0.522152
O	10.521488	13.858134	4.544852
O	19.141172	5.962757	9.599845
O	17.311470	14.972384	13.631092
O	24.200947	10.995789	2.488552
O	25.999548	17.863594	9.584363
O	28.496582	13.503919	9.570977
O	21.652534	7.476617	13.644119
O	21.668858	15.330831	2.480298
O	14.809942	13.546876	9.567952
O	17.336576	17.879007	9.572651
O	26.004137	14.989723	13.680815
O	19.151102	11.047441	2.401376
O	24.159784	6.064891	9.550373
Al	20.093079	5.011323	5.441718
Si	11.460180	12.977006	0.488887
Si	5.834234	6.920258	3.035812
Si	14.512569	4.774980	12.109619
Si	9.889250	7.483091	12.129045
Si	16.089401	13.911331	3.044884
Si	7.463952	2.476179	5.547012
Si	18.528822	6.061596	0.507917
Si	17.018091	1.491498	3.035438
Si	14.539714	10.139004	12.093328
Si	8.973449	3.371442	0.506207
Si	11.432778	14.760273	5.545578
Si	20.113005	5.109886	8.614198
Si	17.638453	16.562468	13.599903
Si	23.218201	9.812229	1.997091
Si	25.665762	18.365389	11.086960

Si	28.770733	14.763536	8.579687
Si	20.116690	6.948401	13.622425
Si	23.183167	15.105368	1.947324
Si	14.525219	13.006468	11.071223
Si	16.107119	17.488268	8.585512
Si	27.187008	13.885922	13.598818
Si	18.543446	12.493011	1.987851
Si	24.749443	6.066447	11.065166
Si	23.185076	6.935645	13.621461
Si	14.526825	14.822380	8.597452
Si	28.767578	13.011490	11.090129
Si	20.127754	15.168811	2.009541
Si	24.765993	12.448101	2.014873
Si	18.545362	6.014606	11.103342
Si	27.202507	17.454086	8.569881
Si	16.123144	13.873333	13.604698
Si	17.609722	18.390333	11.087285
Si	20.135521	9.851276	1.954080
Si	25.657356	16.575293	13.622933
Si	23.201431	5.177813	8.574834
Si	14.551723	14.854354	5.533067
Si	17.027454	3.355718	0.559986
Si	11.416407	10.146184	12.148638
Si	8.986846	1.565441	3.042603
Si	5.876800	5.140090	5.524183
Si	14.529886	13.000557	0.508146
Si	11.442592	4.788709	12.137459
Si	20.097219	7.032587	3.077657
Si	18.459988	2.379842	5.527169
Si	7.455936	6.044448	0.475636
Si	16.067402	7.474154	12.103467
Si	9.899774	13.859434	3.047905
Rh	20.064758	7.732771	6.421256
Rh	20.852911	10.164563	5.331285
Rh	21.788998	9.253915	7.785276
Rh	23.560530	9.123425	5.412187
C	23.814222	9.501516	7.335335
C	23.423147	10.639741	8.070662

CH₃C/H₂Rh₄

155

generated by VMD

H	17.512377	8.917459	6.550291
H	18.105560	9.712749	8.034306
H	18.328922	7.944855	7.810863
H	22.713202	9.841518	6.718044
H	20.685139	11.295236	6.556777
O	10.539621	11.795731	0.005530
O	19.903282	5.834732	7.084874
O	23.382317	8.585916	3.174513
O	24.175419	18.937008	11.199699
O	8.666612	7.108973	11.135290
O	17.344095	12.786988	3.111373
O	16.730015	17.405668	7.116313
O	17.962891	7.503233	0.127553
O	24.136633	16.043650	2.919569
O	14.813190	11.438925	11.218832
O	10.544719	3.146534	0.113424
O	28.480150	14.345466	7.111019

O	15.512803	3.091697	0.066044
O	14.850106	14.320598	7.109214
O	11.209739	11.383627	11.067110
O	19.217024	16.050053	2.990506
O	8.678645	12.811629	3.062504
O	17.313137	7.130706	11.117455
O	26.565125	17.371338	7.105337
O	16.800238	12.411643	13.996937
O	19.186163	18.914280	11.175768
O	19.865137	8.517277	2.848021
O	24.122028	16.801346	14.095599
O	6.142641	5.650660	7.056969
O	19.944288	19.322948	13.703058
O	21.753115	4.419734	5.411250
O	21.736050	6.643412	2.444319
O	23.384621	19.344173	13.720847
O	26.732801	7.587116	13.670303
O	16.669107	15.330195	2.659895
O	14.935204	16.398148	5.418588
O	28.372070	10.606498	13.618656
O	26.702679	15.348013	2.617101
O	14.911252	10.539588	13.738904
O	16.652308	7.574015	13.668291
O	28.380728	16.397932	5.410762
O	19.695980	3.655914	8.615534
O	7.967973	12.300394	0.531479
O	6.386653	9.256576	0.601840
O	18.067001	4.603336	11.543400
O	13.005836	15.310458	8.768083
O	11.291185	0.605526	0.455310
O	14.692393	0.557238	0.414738
O	12.959982	13.338146	11.561202
O	6.253106	3.558366	8.715584
O	19.691528	9.547805	0.406369
O	18.020613	12.255248	0.571814
O	7.951539	4.573174	11.542691
O	11.078812	13.431713	2.052298
O	18.909258	3.890366	5.146080
O	6.988961	6.354765	2.023772
O	14.921088	6.383450	12.071259
O	11.074549	6.362078	12.052687
O	14.968913	13.407236	2.046772
O	7.016968	3.932313	5.195437
O	19.187943	6.074252	2.026623
O	17.276720	2.792039	2.055924
O	12.995338	9.691682	12.121782
O	8.739962	2.772405	2.060091
O	12.991963	14.618301	5.199000
O	21.679667	5.349853	9.048165
O	17.427795	17.152504	12.159687
O	21.701159	10.271452	1.930022
O	25.947941	17.184181	12.171531
O	27.861431	16.105581	9.059687
O	19.720697	6.573957	12.144258
O	23.613777	13.549433	2.106187
O	15.477974	13.852274	12.165594
O	15.529437	16.024027	9.064693
O	27.732067	13.689837	12.132110
O	19.706816	13.575930	2.108797
O	23.588167	6.519690	12.104448
O	13.011812	12.504135	0.509433

O	20.043724	6.485940	4.511056
O	6.114406	6.321000	4.528274
O	13.006344	4.592844	11.676172
O	10.510623	8.908189	11.619207
O	15.474298	13.905545	4.597857
O	8.730186	2.010765	4.604816
O	17.322334	4.959435	0.513621
O	17.220800	1.929057	4.602905
O	15.494482	8.941495	11.673326
O	8.692942	4.950517	0.561988
O	10.514470	13.908991	4.591173
O	19.193029	6.094782	9.606946
O	17.386440	14.954510	13.637116
O	24.170988	11.014036	2.585810
O	26.007866	17.904972	9.620938
O	28.482754	13.579293	9.606563
O	21.674414	7.454556	13.688132
O	21.674021	15.296689	2.483414
O	14.811098	13.532930	9.623139
O	17.346165	17.870176	9.618607
O	25.900827	14.942280	13.584682
O	19.250116	11.032844	2.618989
O	24.184082	6.021842	9.570163
Al	20.127258	5.027903	5.518265
Si	11.475224	13.021445	0.535279
Si	5.880810	6.929523	3.054544
Si	14.539987	4.806998	12.166342
Si	9.906070	7.487183	12.123096
Si	16.108389	13.864717	3.107041
Si	7.503971	2.437759	5.585124
Si	18.543049	6.031397	0.535617
Si	17.008347	1.531226	3.052193
Si	14.547705	10.156697	12.189548
Si	8.993479	3.356148	0.567024
Si	11.424139	14.829778	5.579628
Si	20.122692	5.238834	8.572792
Si	17.661537	16.556225	13.647714
Si	23.247248	9.796814	2.051955
Si	25.717758	18.411207	11.130842
Si	28.786900	14.844183	8.630335
Si	20.134802	6.940361	13.666825
Si	23.203154	15.114897	1.975612
Si	14.512007	13.039557	11.141330
Si	16.122650	17.474144	8.625614
Si	27.149784	13.904405	13.626678
Si	18.566116	12.428757	2.093136
Si	24.764423	6.052110	11.083613
Si	23.202662	6.903047	13.634051
Si	14.548866	14.802080	8.637297
Si	28.768438	13.000495	11.091903
Si	20.135904	15.138427	2.005681
Si	24.787212	12.433146	2.070430
Si	18.574312	6.091643	11.101813
Si	27.207750	17.522722	8.589003
Si	16.180944	13.872220	13.627075
Si	17.644375	18.386238	11.125431
Si	20.139656	9.830861	1.942266
Si	25.660975	16.548883	13.634758
Si	23.223469	5.148563	8.583611
Si	14.554199	14.819783	5.583998
Si	17.047707	3.354128	0.549572

Si	11.435841	10.147604	12.106623
Si	9.000371	1.535407	3.080579
Si	5.878227	5.051336	5.548961
Si	14.546826	13.023658	0.527932
Si	11.465976	4.790809	12.153096
Si	20.205145	6.923844	2.966086
Si	18.445976	2.423775	5.562125
Si	7.512652	6.058260	0.515070
Si	16.094975	7.504122	12.134852
Si	9.911367	13.885077	3.086869
Rh	20.880724	7.779412	6.103619
Rh	19.999216	10.516976	5.305955
Rh	21.205666	9.843138	7.655279
Rh	22.401430	9.475524	5.157316
C	19.647558	9.168267	6.619745
C	18.324123	8.920130	7.297976

CH₃C/H₄Rh₄

157

generated by VMD

H	19.135448	11.398822	4.992551
H	22.087467	7.964933	7.479723
H	17.890257	8.594159	6.557423
H	18.115763	9.755651	7.895715
H	18.548695	8.021918	8.118444
H	22.686382	9.905449	6.604807
H	21.028450	11.275476	7.466494
O	10.504612	11.787985	0.002608
O	19.945629	5.809647	7.096952
O	23.287546	8.608288	3.215528
O	15.473127	3.951222	11.145793
O	8.643221	7.106761	11.122099
O	17.319185	12.808372	3.037891
O	16.709394	17.433460	7.107862
O	17.921104	7.496398	0.068115
O	15.449121	1.021521	2.912599
O	14.792462	11.443512	11.243584
O	10.522682	3.169179	0.092500
O	28.463764	14.364268	7.087645
O	15.486240	3.096499	0.053871
O	14.815999	14.275072	7.097377
O	11.174597	11.377016	11.073684
O	19.182137	16.022137	2.997114
O	8.651278	12.818871	3.056980
O	17.280638	7.105348	11.115889
O	26.560726	17.337446	7.086924
O	16.760614	12.404289	13.983110
O	19.162838	18.900780	11.172007
O	19.905764	8.565503	2.878165
O	24.096720	16.772602	14.097730
O	6.099643	5.574653	7.056128
O	19.919838	19.314056	13.695528
O	21.709116	4.459119	5.326245
O	21.692398	6.607870	2.509508
O	23.370600	19.310595	13.685422
O	26.701054	7.583229	13.661490
O	16.613918	15.350012	2.646276
O	14.921480	16.373125	5.437875
O	28.355936	10.597071	13.632446

O	26.684153	15.346746	2.587380
O	14.877517	10.521775	13.757119
O	16.634369	7.583620	13.668304
O	28.384760	16.413137	5.376505
O	19.679926	3.627551	8.604422
O	7.931728	12.298503	0.530965
O	6.357135	9.231611	0.633124
O	18.041029	4.573489	11.533657
O	12.991247	15.301535	8.758691
O	11.262979	0.628298	0.459882
O	14.667112	0.562001	0.408092
O	12.919712	13.334115	11.550088
O	6.232499	3.522352	8.751119
O	19.778131	9.411195	0.356561
O	17.973417	12.416783	0.470729
O	7.931268	4.565389	11.527752
O	11.057707	13.420022	2.043618
O	18.867119	3.902568	5.149122
O	6.944960	6.403004	2.028116
O	14.889140	6.388113	12.085816
O	11.042009	6.353825	12.046972
O	14.921570	13.417359	2.027099
O	6.970044	3.905083	5.156145
O	19.139656	6.141845	2.027609
O	17.250568	2.793216	2.046329
O	12.971449	9.689004	12.121426
O	8.740191	2.773301	2.058877
O	12.977481	14.607726	5.174926
O	21.665981	5.308959	9.087080
O	17.393673	17.145407	12.160316
O	21.677376	10.328361	1.935789
O	25.854000	17.148195	12.105934
O	27.838200	16.085863	9.063916
O	19.686457	6.560744	12.142413
O	23.580782	13.549582	2.102940
O	15.421959	13.868899	12.181028
O	15.530300	15.989459	9.028405
O	27.678753	13.704933	12.076355
O	19.710852	13.568996	2.082263
O	23.569380	6.514965	12.093567
O	12.983433	12.487630	0.486734
O	19.948620	6.553266	4.544416
O	6.121735	6.340971	4.554520
O	12.977492	4.596717	11.661954
O	10.487641	8.905209	11.622118
O	15.461024	13.891513	4.577247
O	8.708555	2.001851	4.601472
O	17.304668	4.960751	0.516362
O	17.214058	1.918021	4.585545
O	15.475534	8.942068	11.676170
O	8.656239	4.958094	0.592433
O	10.490520	13.923375	4.575449
O	19.171055	6.063694	9.607381
O	17.343113	14.951241	13.647629
O	24.149719	11.014071	2.596484
O	25.975677	17.906214	9.581713
O	28.472355	13.550175	9.568551
O	21.650469	7.457785	13.665385
O	21.651667	15.313313	2.480281
O	14.787008	13.520639	9.627931
O	17.334188	17.842329	9.616443

O	25.963472	14.988854	13.638550
O	19.145748	11.014879	2.402512
O	24.168289	6.008628	9.554930
Al	20.080429	5.051240	5.491423
Si	11.449840	13.010046	0.525006
Si	5.839696	6.940986	3.082053
Si	14.513318	4.807701	12.145606
Si	9.879083	7.483269	12.116556
Si	16.076824	13.867990	3.075136
Si	7.480505	2.425060	5.577451
Si	18.514772	6.046062	0.529025
Si	16.990751	1.526109	3.035455
Si	14.524122	10.151862	12.200991
Si	8.974637	3.366145	0.567908
Si	11.413486	14.840175	5.554964
Si	20.116962	5.203614	8.591288
Si	17.625551	16.551596	13.649297
Si	23.209024	9.809384	2.062983
Si	25.672724	18.404106	11.092800
Si	28.771503	14.834463	8.614805
Si	20.107626	6.950706	13.658535
Si	23.177185	15.117998	1.969104
Si	14.476470	13.040364	11.148579
Si	16.111061	17.452295	8.621669
Si	27.160416	13.894341	13.600556
Si	18.531427	12.459948	2.004516
Si	24.745102	6.045074	11.072184
Si	23.178734	6.904409	13.621799
Si	14.530064	14.776129	8.622849
Si	28.732876	12.993700	11.068339
Si	20.114653	15.136785	2.001734
Si	24.757082	12.435927	2.071110
Si	18.543457	6.067187	11.102707
Si	27.186678	17.498552	8.575136
Si	16.139088	13.868754	13.635614
Si	17.621786	18.372671	11.120592
Si	20.123442	9.833708	1.893664
Si	25.638897	16.579567	13.609375
Si	23.202435	5.107989	8.597065
Si	14.539648	14.791521	5.572617
Si	17.021681	3.357429	0.540928
Si	11.411199	10.144431	12.115180
Si	8.972533	1.527342	3.074723
Si	5.850812	5.033668	5.523785
Si	14.520541	13.004148	0.510295
Si	11.439013	4.784320	12.146341
Si	20.160133	6.960867	2.992749
Si	18.435268	2.419442	5.544294
Si	7.473922	6.063120	0.527685
Si	16.070675	7.501174	12.138048
Si	9.889675	13.886564	3.070985
Rh	21.013283	7.658763	6.220467
Rh	20.294336	10.824117	5.948527
Rh	21.514400	9.625288	7.947360
Rh	22.171024	9.584532	5.061386
C	19.929085	9.139208	6.897948
C	18.540657	8.863193	7.406345

CH₃C/H₆Rh₄

generated by VMD

H	21.505749	9.114659	9.036424
H	21.773920	10.913530	8.765743
H	18.374735	9.663457	5.085654
H	21.927103	7.999691	7.149108
H	17.762312	8.564425	7.867309
H	18.394724	9.959044	8.789457
H	19.064909	8.325083	9.064579
H	22.264870	10.357092	5.876488
H	21.955444	11.346300	7.999675
O	10.539497	11.788362	-0.066048
O	19.824814	5.773765	7.099479
O	23.264109	8.591549	3.070129
O	15.482068	3.922052	11.099926
O	8.666306	7.114829	11.119506
O	17.315331	12.806108	3.003970
O	16.677710	17.432024	7.076273
O	17.904081	7.433942	-0.121016
O	24.151747	16.005669	2.897602
O	14.832027	11.413553	11.138822
O	10.524646	3.179811	0.024693
O	11.146288	14.286562	7.070829
O	15.509600	3.088895	0.079606
O	14.879289	14.339453	7.062305
O	11.160140	11.414575	11.154486
O	19.211828	16.036085	3.030679
O	8.667501	12.802633	3.026223
O	17.327950	7.089283	11.137108
O	26.584522	17.348387	7.080975
O	16.784744	12.433189	14.012566
O	19.172483	18.923475	11.141719
O	20.090336	8.623780	2.999585
O	15.477679	11.771392	0.001933
O	6.159760	5.653287	7.049170
O	19.948162	19.319510	13.668616
O	21.724495	4.538194	5.361427
O	21.669315	6.529144	2.548850
O	23.403429	19.291996	13.640483
O	26.720205	7.571212	13.662578
O	16.662390	15.363550	2.609631
O	14.898466	16.414471	5.367895
O	28.417938	10.543035	13.685610
O	26.724863	15.327616	2.584159
O	14.916590	10.553927	13.674245
O	16.615957	7.591551	13.663420
O	28.392834	16.352758	5.390125
O	19.758228	3.568386	8.595110
O	7.982085	12.341220	0.480740
O	6.320405	9.274852	0.502204
O	18.026762	4.546379	11.598955
O	13.003410	15.292288	8.711514
O	11.279391	0.658968	0.489866
O	14.660787	0.558371	0.401629
O	12.995066	13.317770	11.523859
O	6.231673	3.567723	8.719405
O	19.719048	9.310383	0.458205
O	18.033005	12.373718	0.449681
O	7.940973	4.578256	11.512428
O	11.073535	13.392909	2.006379
O	18.919628	3.838249	5.095738

O	6.907773	6.342451	1.986839
O	14.916643	6.367484	12.045576
O	11.071924	6.367179	12.033993
O	14.924623	13.465178	2.004798
O	6.961228	3.956451	5.150114
O	19.088490	6.334965	1.987017
O	17.285059	2.770583	2.056501
O	12.998507	9.701221	12.077595
O	8.794021	2.786404	2.029915
O	13.002246	14.578617	5.163936
O	21.666555	5.358204	9.015850
O	17.412794	17.148365	12.104257
O	21.696278	10.395603	1.849181
O	25.840786	17.114239	12.097530
O	27.840212	16.033792	9.026487
O	19.733086	6.502531	12.145751
O	23.596731	13.527329	2.068113
O	15.523396	13.816322	12.095317
O	15.518231	16.032185	9.037723
O	27.791885	13.820617	12.080767
O	19.710623	13.585308	2.087709
O	23.593678	6.531937	12.102608
O	13.009007	12.486720	0.456158
O	19.838570	6.514794	4.534182
O	6.153671	6.397264	4.531306
O	12.993505	4.591553	11.627681
O	10.503738	8.919050	11.637826
O	15.497477	13.929632	4.550652
O	8.692423	2.043139	4.572956
O	17.341555	4.942376	0.543055
O	17.227701	1.872030	4.590915
O	15.493688	8.918466	11.627866
O	8.672272	4.967594	0.552029
O	10.526727	13.868512	4.547588
O	19.163477	5.963726	9.635249
O	17.358995	14.968259	13.612044
O	24.197001	10.987070	2.497927
O	26.041256	17.903034	9.587721
O	28.521429	13.521843	9.565250
O	21.669008	7.473896	13.668460
O	21.676218	15.292410	2.496318
O	14.820985	13.524108	9.562695
O	17.337986	17.884850	9.572589
O	25.967134	14.965423	13.634140
O	19.174152	11.031756	2.450022
O	24.165882	6.040290	9.561629
Al	20.069435	5.030735	5.497970
Si	11.473055	13.005217	0.484905
Si	5.835564	6.940355	3.045588
Si	14.533208	4.789850	12.102355
Si	9.900215	7.488583	12.116085
Si	16.094810	13.896357	3.043666
Si	7.456887	2.467345	5.542709
Si	18.524212	6.051788	0.489556
Si	17.020369	1.495351	3.034087
Si	14.557946	10.148514	12.131609
Si	8.987348	3.376186	0.532306
Si	11.433708	14.782152	5.543063
Si	20.111090	5.169335	8.577568
Si	17.652191	16.565241	13.597140
Si	23.220587	9.810325	1.969689

Si	25.685848	18.380713	11.091643
Si	28.792423	14.793446	8.587296
Si	20.131197	6.953477	13.651073
Si	23.194605	15.097415	1.958524
Si	14.539397	13.017209	11.079289
Si	16.100475	17.487432	8.596627
Si	27.166073	13.878204	13.574510
Si	18.547756	12.464044	1.993777
Si	24.757864	6.064127	11.069846
Si	23.194540	6.911951	13.628239
Si	14.554632	14.803217	8.590672
Si	28.789715	13.016569	11.080837
Si	20.134445	15.151653	2.022999
Si	24.787077	12.426653	2.019143
Si	18.562895	6.018390	11.133357
Si	27.230642	17.473520	8.564772
Si	16.163683	13.876231	13.584295
Si	17.631493	18.393736	11.083795
Si	20.156664	9.859780	1.918427
Si	25.657026	16.558882	13.607801
Si	23.216547	5.159836	8.571383
Si	14.560865	14.826108	5.537414
Si	17.049850	3.340196	0.554403
Si	11.438350	10.146216	12.139840
Si	9.000905	1.551665	3.062052
Si	5.868492	5.118440	5.524225
Si	14.541274	13.011260	0.493880
Si	11.458253	4.793296	12.119076
Si	20.164371	6.966967	3.014747
Si	18.458374	2.378376	5.535746
Si	7.485428	6.068929	0.495405
Si	16.089462	7.487833	12.120730
Si	9.915917	13.855891	3.046296
Rh	20.559647	7.772467	6.234279
Rh	19.368488	10.566793	5.867222
Rh	21.624250	9.705523	7.580283
Rh	21.360952	9.624833	4.749962
C	19.693878	9.252581	7.222809
C	18.672541	9.009416	8.300933

CH₃C/H₈Rh₄

161

generated by VMD

H	20.861496	11.589958	6.478344
H	21.671663	7.975886	5.449179
H	23.216204	9.463082	7.765499
H	22.396551	10.592175	8.860044
H	18.541517	9.291837	5.392314
H	21.541225	7.534138	7.236581
H	18.710644	8.860577	8.904675
H	19.516230	10.415922	9.303947
H	20.337303	8.856381	9.636725
H	22.772898	9.843086	5.708791
H	21.829760	11.333868	8.639342
O	19.140785	16.775930	14.051678
O	19.721081	5.765275	7.075752
O	23.173101	8.602541	3.058549
O	15.424145	3.913523	11.098585
O	8.600813	7.101632	11.106961

O	17.252785	12.776831	2.994548
O	16.610769	17.404583	7.060804
O	26.462828	12.406145	13.938836
O	24.087618	15.996657	2.894918
O	14.778583	11.408896	11.128116
O	10.461986	3.171181	0.025054
O	11.071026	14.278321	7.060627
O	15.453091	3.091651	0.065661
O	14.837234	14.333873	7.048806
O	11.094713	11.414268	11.132862
O	19.158257	16.037390	3.012039
O	8.611889	12.778786	3.001751
O	17.273453	7.110774	11.119555
O	26.533659	17.327278	7.067227
O	16.748886	12.404053	13.949609
O	19.110155	18.926327	11.121794
O	20.103203	8.632549	3.010623
O	15.422957	11.783229	-0.024627
O	6.119943	5.657681	7.030111
O	19.887465	19.311270	13.649493
O	21.671751	4.574846	5.340270
O	21.608828	6.498931	2.571536
O	23.333645	19.303116	13.634536
O	26.662085	7.575497	13.644682
O	16.618235	15.336978	2.591793
O	14.824078	16.400120	5.346732
O	28.348820	10.532303	13.656360
O	26.656998	15.308308	2.575629
O	14.843777	10.548762	13.662538
O	16.558529	7.576375	13.651667
O	28.338984	16.327944	5.366524
O	19.679630	3.579750	8.590846
O	7.925808	12.326646	0.452522
O	6.294378	9.228510	0.487123
O	17.972771	4.564864	11.552570
O	12.947627	15.281550	8.681785
O	11.226568	0.649141	0.470512
O	14.606311	0.562258	0.393617
O	12.939803	13.309104	11.509698
O	6.166005	3.557647	8.689457
O	19.585522	9.288172	0.475407
O	17.993917	12.306804	0.456512
O	7.874177	4.565084	11.503284
O	11.016301	13.387133	1.989352
O	18.884144	3.813090	5.089813
O	6.848366	6.391026	1.946030
O	14.863567	6.364135	12.023516
O	11.010419	6.365426	12.020498
O	14.866998	13.454327	1.992522
O	6.897836	3.937720	5.141811
O	19.040302	6.409307	1.924869
O	17.225773	2.751263	2.042181
O	12.932889	9.698048	12.050656
O	8.722114	2.772034	2.023138
O	12.942738	14.543584	5.163677
O	21.603632	5.359980	8.966792
O	17.365082	17.135788	12.079759
O	21.636202	10.376399	1.751640
O	25.812540	17.136389	12.096269
O	27.794973	16.037451	9.020365
O	19.675816	6.515418	12.129830

O	23.546364	13.522917	2.042736
O	15.469633	13.818139	12.068668
O	15.455420	16.024872	9.036410
O	27.746307	13.827501	12.070799
O	19.640148	13.581246	2.072080
O	23.529354	6.527498	12.092569
O	12.952231	12.481922	0.440856
O	19.690083	6.482822	4.488036
O	6.156720	6.383200	4.499672
O	12.933809	4.593306	11.611910
O	10.437638	8.913132	11.606075
O	15.440265	13.916803	4.536868
O	8.624126	2.017612	4.561296
O	17.289751	4.936144	0.553385
O	17.173752	1.862118	4.580125
O	15.432278	8.916972	11.622648
O	8.597025	4.951630	0.549784
O	10.466503	13.843306	4.533859
O	19.117296	6.007028	9.609687
O	17.316154	14.954414	13.586287
O	24.127829	10.979856	2.461102
O	25.971983	17.890480	9.572699
O	28.464064	13.521715	9.552693
O	21.609739	7.475524	13.658672
O	21.616360	15.277057	2.480328
O	14.760115	13.512260	9.543062
O	17.273310	17.887808	9.552231
O	25.869053	14.946674	13.577243
O	19.155542	11.027104	2.488086
O	24.094580	6.025010	9.554259
Al	20.009302	5.041733	5.452840
Si	11.416147	12.998987	0.468006
Si	5.776451	6.932566	3.031148
Si	14.472407	4.789250	12.091323
Si	9.836893	7.485538	12.097277
Si	16.040409	13.875600	3.032072
Si	7.387927	2.446023	5.528243
Si	18.457903	6.057766	0.455156
Si	16.958727	1.481493	3.025951
Si	14.491371	10.144753	12.117106
Si	8.921533	3.362463	0.527501
Si	11.372453	14.757584	5.530437
Si	20.039606	5.173816	8.561321
Si	17.602430	16.553331	13.573078
Si	23.158102	9.805353	1.922619
Si	25.632126	18.386295	11.075667
Si	28.733980	14.789643	8.571683
Si	20.072334	6.951445	13.641411
Si	23.136480	15.091701	1.947258
Si	14.482901	13.010615	11.061062
Si	16.037083	17.475700	8.580875
Si	27.072367	13.863880	13.544234
Si	18.498272	12.438132	2.000945
Si	24.692381	6.051865	11.060850
Si	23.136654	6.913469	13.619733
Si	14.500027	14.793948	8.574286
Si	28.732597	13.014930	11.067105
Si	20.074360	15.143186	2.006945
Si	24.730639	12.417845	1.990576
Si	18.508673	6.042193	11.106959
Si	27.166735	17.466734	8.553479

Si	16.128092	13.855684	13.549450
Si	17.571989	18.388744	11.065365
Si	20.098488	9.847205	1.902630
Si	25.600727	16.548307	13.590114
Si	23.160936	5.150887	8.545287
Si	14.501623	14.808522	5.524306
Si	16.994368	3.335786	0.545723
Si	11.371155	10.140547	12.111330
Si	8.941696	1.534460	3.050309
Si	5.825953	5.122268	5.504139
Si	14.481963	13.013473	0.479055
Si	11.397514	4.791813	12.102019
Si	20.097918	6.966992	3.013238
Si	18.410515	2.358696	5.522362
Si	7.425276	6.065925	0.465292
Si	16.031607	7.487303	12.108071
Si	9.856072	13.838039	3.031984
Rh	20.271769	7.787633	6.422437
Rh	19.624569	10.349532	6.013295
Rh	22.009388	10.411205	7.267827
Rh	21.584732	9.422986	4.685082
C	20.302219	9.401088	7.565313
C	19.677794	9.390082	8.932520

CH₃C/H₁₀Rh₄

163

generated by VMD

H	18.322847	11.291756	6.989650
H	18.519817	9.097360	5.486604
H	20.560698	11.629889	6.502276
H	21.766645	8.071892	5.430446
H	23.112816	9.701576	7.754306
H	22.208172	10.789644	8.877635
H	17.831743	10.607399	6.660231
H	21.656542	7.410474	7.077670
H	18.796055	8.611114	8.960102
H	19.497574	10.200445	9.403660
H	20.447372	8.694094	9.632296
H	22.647377	9.969060	5.757071
H	21.579521	11.445637	8.668301
O	19.162985	16.770527	14.022223
O	19.702061	5.786119	7.069173
O	23.248770	8.578227	2.991952
O	24.112938	18.921515	11.065899
O	8.624607	7.099489	11.084202
O	17.267756	12.778607	2.963201
O	16.614117	17.423523	7.037704
O	26.502138	12.398530	13.918506
O	24.115540	15.985386	2.877002
O	14.795359	11.385590	11.081712
O	10.480846	3.160598	-0.004904
O	28.433407	14.270551	7.044446
O	15.471354	3.087407	0.058008
O	14.865745	14.332866	7.022731
O	28.464777	11.411763	11.132644
O	19.177769	16.029947	3.003794
O	8.632290	12.775154	2.982206
O	17.300062	7.090425	11.116986
O	26.547165	17.300640	7.055166

O	16.757147	12.420243	13.981987
O	19.129393	18.922583	11.103257
O	20.096380	8.630724	3.020705
O	24.105648	16.760595	14.113252
O	6.170113	5.645577	7.016553
O	19.912521	19.305351	13.631311
O	21.684292	4.547223	5.387330
O	21.628920	6.521730	2.514706
O	23.362152	19.277922	13.603588
O	26.676582	7.567724	13.624831
O	16.636084	15.342516	2.571721
O	14.843363	16.399521	5.320045
O	28.380817	10.517395	13.653673
O	26.686121	15.302299	2.556978
O	14.875157	10.557580	13.626742
O	16.570946	7.564023	13.641701
O	28.357899	16.321674	5.350874
O	19.703968	3.571038	8.546906
O	7.953206	12.336625	0.429133
O	6.275919	9.265747	0.418729
O	17.987183	4.542277	11.560639
O	12.974973	15.269851	8.662372
O	11.249329	0.644314	0.465922
O	14.624358	0.554843	0.379578
O	12.979120	13.302628	11.485206
O	6.175713	3.554873	8.690701
O	19.631798	9.270420	0.467892
O	18.021957	12.314974	0.428427
O	7.894959	4.564082	11.483549
O	11.037106	13.373508	1.968182
O	18.895746	3.809478	5.095341
O	6.867663	6.315703	1.944286
O	14.883114	6.350291	12.006593
O	11.031250	6.360277	12.003755
O	14.880857	13.460748	1.970495
O	6.908627	3.940926	5.101418
O	19.051304	6.402458	1.920316
O	17.252335	2.744395	2.024528
O	12.959036	9.684287	12.036999
O	8.753450	2.774580	2.004582
O	12.963602	14.540056	5.146600
O	21.617456	5.364139	8.927796
O	17.381920	17.132238	12.054606
O	21.656618	10.369071	1.791478
O	25.810802	17.113785	12.076542
O	27.826542	16.029972	9.007883
O	19.706165	6.487316	12.120076
O	23.564175	13.512893	2.026451
O	15.520639	13.780405	12.031900
O	15.480292	16.021076	9.011959
O	27.790087	13.830982	12.061020
O	19.665764	13.574050	2.061827
O	23.555723	6.527036	12.082373
O	12.974018	12.469852	0.419109
O	19.765350	6.463556	4.472389
O	6.122906	6.383668	4.486994
O	12.952669	4.583848	11.589883
O	10.460725	8.910316	11.595248
O	15.460169	13.915554	4.512733
O	8.643339	2.023171	4.542435
O	17.312645	4.930576	0.535094

O	17.195631	1.855348	4.561394
O	15.457688	8.901520	11.603534
O	8.627714	4.947031	0.507121
O	10.490789	13.835626	4.514699
O	19.131069	5.972073	9.610184
O	17.328226	14.955911	13.566241
O	24.158937	10.969357	2.426023
O	26.006401	17.884531	9.559965
O	28.492233	13.512914	9.539561
O	21.631262	7.469182	13.645982
O	21.640257	15.271565	2.473718
O	14.793507	13.501391	9.511357
O	17.291731	17.889185	9.528809
O	25.912092	14.940131	13.577041
O	19.161697	11.019279	2.462984
O	24.104525	6.027101	9.542979
Al	20.024082	5.033206	5.464287
Si	11.438486	12.989847	0.446013
Si	5.798756	6.924387	2.999583
Si	14.492852	4.774845	12.065394
Si	9.858092	7.480876	12.079450
Si	16.058168	13.879493	3.007088
Si	7.401149	2.452847	5.501337
Si	18.485304	6.048567	0.443577
Si	16.985758	1.473542	3.007053
Si	14.517853	10.133471	12.089201
Si	8.943531	3.356073	0.503787
Si	11.393264	14.751712	5.513700
Si	20.050152	5.169894	8.538068
Si	17.621563	16.553041	13.549025
Si	23.186562	9.793669	1.889891
Si	25.649113	18.370501	11.060991
Si	28.760809	14.779695	8.555782
Si	20.096132	6.939174	13.628427
Si	23.157972	15.083091	1.933114
Si	14.517520	12.991542	11.026959
Si	16.050482	17.478771	8.562051
Si	27.115072	13.857469	13.534079
Si	18.518070	12.437256	1.977487
Si	24.713102	6.051557	11.044786
Si	23.158026	6.908444	13.608572
Si	14.528183	14.787622	8.549485
Si	28.768177	13.010886	11.054661
Si	20.097530	15.137439	2.000980
Si	24.754368	12.413018	1.966671
Si	18.529726	6.015368	11.107839
Si	27.193142	17.455027	8.534616
Si	16.139988	13.857103	13.527649
Si	17.590738	18.386915	11.043085
Si	20.116585	9.837651	1.901826
Si	25.625065	16.538563	13.578738
Si	23.179470	5.148819	8.529333
Si	14.523209	14.808123	5.500409
Si	17.015244	3.330444	0.529759
Si	11.399585	10.132503	12.105011
Si	8.963570	1.536249	3.033135
Si	5.836336	5.116006	5.495536
Si	14.504219	12.999639	0.460752
Si	11.418154	4.786284	12.083597
Si	20.124647	6.962599	2.992775
Si	18.426954	2.348766	5.511841

Si	7.447086	6.054831	0.452507
Si	16.052052	7.472097	12.095497
Si	9.880358	13.829919	3.012539
Rh	20.343849	7.788339	6.373229
Rh	19.418653	10.322573	6.106918
Rh	21.832979	10.545373	7.273537
Rh	21.480610	9.512616	4.728678
C	20.283247	9.328645	7.591391
C	19.722572	9.208486	8.979763

CH₂C/H₃Rh₄

155

generated by VMD

H	21.454723	8.538975	9.236662
H	19.357021	10.457227	8.485580
H	19.209316	8.620640	8.681260
H	22.440567	10.463691	6.583879
H	20.180838	11.630296	5.939515
O	10.525993	11.783537	-0.030280
O	19.952522	5.838977	7.051880
O	23.318487	8.575206	3.162336
O	15.482746	3.908512	11.183119
O	8.650203	7.098300	11.094169
O	17.322720	12.763344	3.089338
O	16.727594	17.386707	7.089463
O	17.913280	7.488612	0.077080
O	15.448401	1.006304	2.881757
O	14.788727	11.435308	11.200168
O	10.522663	3.136106	0.085591
O	28.462692	14.346121	7.083891
O	15.484785	3.080641	0.041177
O	14.826364	14.311162	7.087106
O	11.181947	11.379501	11.043545
O	19.205282	16.049501	2.958020
O	8.649171	12.802413	3.050569
O	17.290243	7.126701	11.080734
O	26.522816	17.338709	7.076313
O	16.782402	12.392907	13.960836
O	19.164259	18.904526	11.160547
O	19.878735	8.524408	2.847378
O	24.106606	16.806122	14.072141
O	23.423294	5.636683	7.026137
O	19.922243	19.318216	13.686455
O	21.727188	4.404182	5.343427
O	21.707176	6.612253	2.422597
O	23.363230	19.347187	13.704059
O	26.701202	7.575831	13.634779
O	16.660944	15.310606	2.643033
O	14.924574	16.387379	5.395021
O	28.344412	10.601674	13.595335
O	26.685402	15.332704	2.588540
O	14.885904	10.526136	13.717646
O	16.632946	7.565702	13.633305
O	28.355116	16.394793	5.378570
O	19.644558	3.661755	8.553090
O	7.954097	12.262608	0.521615
O	6.393776	9.242700	0.594930
O	18.046858	4.600512	11.501937
O	12.987238	15.308434	8.744969

O	11.262345	0.592848	0.420356
O	14.678284	0.540560	0.374081
O	12.932531	13.332898	11.538302
O	6.253689	3.547895	8.677928
O	19.652525	9.515814	0.385353
O	18.011883	12.225408	0.556657
O	7.925602	4.564985	11.501736
O	11.049589	13.405994	2.028809
O	18.869387	3.886542	5.143907
O	6.963728	6.360350	1.996309
O	14.899946	6.376753	12.039716
O	11.052155	6.354410	12.028298
O	14.949659	13.401015	2.028209
O	7.000315	3.921035	5.180574
O	19.148333	6.101987	1.995685
O	17.258909	2.775310	2.022907
O	12.969443	9.687678	12.097917
O	8.712384	2.753778	2.026956
O	12.973925	14.617764	5.172400
O	21.660051	5.296078	9.051659
O	17.397217	17.149267	12.142878
O	21.686365	10.268849	1.874122
O	25.938080	17.186205	12.153360
O	27.845139	16.107410	9.031837
O	19.695881	6.568169	12.111024
O	23.591303	13.531299	2.067711
O	15.446885	13.848263	12.150030
O	15.515120	16.013910	9.038393
O	27.704010	13.689080	12.099618
O	19.682688	13.569954	2.085102
O	23.571489	6.516563	12.068985
O	12.993722	12.500958	0.487121
O	20.011204	6.487732	4.489238
O	6.093174	6.312356	4.504732
O	12.984084	4.583828	11.659332
O	10.486826	8.901940	11.593971
O	15.456924	13.891633	4.579149
O	8.716800	2.007070	4.574607
O	17.297709	4.946222	0.490968
O	17.195948	1.919114	4.567553
O	15.469055	8.935225	11.645217
O	8.666325	4.937533	0.544868
O	10.497894	13.900618	4.565950
O	19.174522	6.093550	9.569301
O	17.379124	14.935182	13.598836
O	24.141869	11.000459	2.585878
O	25.978077	17.890182	9.595286
O	28.461849	13.576662	9.577656
O	21.651810	7.436262	13.659422
O	21.656527	15.285796	2.440158
O	14.786263	13.527782	9.603937
O	17.338459	17.851490	9.594856
O	25.869194	14.936195	13.551239
O	19.252251	11.022974	2.603644
O	24.163830	6.018231	9.529737
Al	20.102791	5.017100	5.477086
Si	11.454488	13.010330	0.510357
Si	5.850332	6.920515	3.030219
Si	14.518637	4.801491	12.146168
Si	9.882361	7.478391	12.090781
Si	16.092798	13.848199	3.088975

Si	7.494073	2.425477	5.561362
Si	18.508234	6.027870	0.503761
Si	16.987516	1.514954	3.018341
Si	14.523559	10.149032	12.166009
Si	8.970687	3.343896	0.537283
Si	11.405205	14.827787	5.551145
Si	20.111004	5.232913	8.548395
Si	17.645639	16.538021	13.622458
Si	23.227169	9.782009	2.034526
Si	25.696768	18.405416	11.104783
Si	28.768297	14.843661	8.603899
Si	20.110277	6.929816	13.633711
Si	23.184723	15.097849	1.934170
Si	14.486001	13.034834	11.121872
Si	16.117680	17.459253	8.597702
Si	27.110134	13.891161	13.590656
Si	18.551859	12.415399	2.077872
Si	24.743004	6.046544	11.045016
Si	23.180737	6.890881	13.599255
Si	14.529202	14.795130	8.614991
Si	28.742893	12.996176	11.063628
Si	20.115788	15.130464	1.971517
Si	24.763744	12.413610	2.054615
Si	18.553310	6.090486	11.064149
Si	27.171858	17.513800	8.554778
Si	16.169214	13.858005	13.601950
Si	17.622999	18.376146	11.101997
Si	20.128279	9.822181	1.903111
Si	25.643358	16.544746	13.612011
Si	23.198507	5.131923	8.559148
Si	14.537016	14.810420	5.561160
Si	17.020967	3.341131	0.519331
Si	11.409971	10.142590	12.082705
Si	8.985867	1.524322	3.052165
Si	5.851066	5.032744	5.513576
Si	14.527627	13.023914	0.507905
Si	11.443889	4.783776	12.135343
Si	20.182030	6.915880	2.946194
Si	18.412497	2.410948	5.537450
Si	7.489072	6.047645	0.490279
Si	16.073980	7.497899	12.100528
Si	9.887861	13.869884	3.064413
Rh	20.948196	7.710276	6.160345
Rh	19.922693	10.318360	5.158683
Rh	21.717319	9.314986	7.885389
Rh	22.340170	9.603552	5.217646
C	19.963387	9.293647	6.740368
C	19.653204	9.458653	8.134532

CH₂C/H₅Rh₄

157

generated by VMD

H	21.658684	10.806907	5.451740
H	21.002850	12.050783	6.832372
H	19.502769	9.358870	5.504119
H	23.394785	9.140774	8.750382
H	21.257677	10.027658	9.589448
H	20.572197	8.310249	9.714449
H	22.929701	9.127126	6.561764

O	19.087751	16.782934	14.067153
O	19.881750	5.881769	7.045185
O	23.264505	8.576353	3.126740
O	15.401266	3.943259	11.095892
O	25.906151	7.088757	11.052520
O	17.241634	12.821038	2.998821
O	16.673441	17.368166	7.052923
O	17.867056	7.497470	0.011640
O	15.379921	1.019837	2.849501
O	14.740342	11.435900	11.160966
O	10.441073	3.169006	0.015838
O	28.385818	14.371279	7.036261
O	15.409102	3.095197	-0.008250
O	14.764578	14.309867	7.037854
O	11.080170	11.382679	10.993889
O	19.104324	16.039227	2.940431
O	8.566553	12.823586	3.007213
O	17.198528	7.094030	11.060709
O	26.454163	17.289301	7.032194
O	16.660231	12.408468	13.939516
O	19.078188	18.894054	11.123001
O	19.807695	8.537855	2.806790
O	24.023449	16.776550	14.055741
O	23.339687	5.698550	7.034618
O	19.849514	19.314451	13.641647
O	21.653717	4.516180	5.293882
O	21.607998	6.580605	2.521710
O	23.288782	19.309095	13.630290
O	26.623802	7.587293	13.582758
O	16.543232	15.364384	2.580683
O	14.834714	16.409161	5.373771
O	28.277313	10.581554	13.540413
O	26.617420	15.349207	2.547315
O	14.783073	10.519355	13.672447
O	16.547867	7.566787	13.605653
O	28.297659	16.403902	5.311669
O	19.558788	3.655759	8.483848
O	7.866859	12.309438	0.475141
O	6.251322	9.247308	0.555805
O	17.974304	4.568285	11.470403
O	12.924958	15.303297	8.697396
O	11.179944	0.630458	0.404172
O	14.586345	0.560739	0.350509
O	12.857972	13.310777	11.483306
O	6.151506	3.507706	8.584596
O	19.657047	9.483267	0.329796
O	17.915831	12.344654	0.450206
O	7.849678	4.557842	11.513625
O	10.971006	13.412450	1.985482
O	18.817940	3.900782	5.170616
O	6.848025	6.329834	1.955289
O	14.800169	6.379980	12.021479
O	10.968305	6.348111	11.981245
O	14.847805	13.429470	1.974987
O	6.909531	3.953539	5.217487
O	19.088358	6.106848	1.934085
O	17.183857	2.787776	1.968497
O	12.891224	9.694856	12.013502
O	8.664753	2.789341	1.986349
O	12.904831	14.618536	5.129534
O	21.572664	5.267260	9.032336

O	17.312349	17.126926	12.097653
O	21.596685	10.306728	1.916120
O	25.790380	17.158512	12.074796
O	27.789433	16.110380	9.011699
O	19.616497	6.556074	12.079136
O	23.499409	13.546129	2.041936
O	15.355441	13.863996	12.111055
O	15.455224	15.994752	9.002805
O	27.637730	13.715721	12.039974
O	19.623621	13.578475	2.030612
O	23.483128	6.513742	12.038151
O	12.907536	12.486362	0.441859
O	19.743542	6.527375	4.472726
O	6.098526	6.373721	4.506313
O	12.898230	4.580507	11.600809
O	10.411627	8.894791	11.529147
O	15.389985	13.925250	4.521161
O	8.612929	2.047004	4.523337
O	17.226004	4.961211	0.437030
O	17.139261	1.956198	4.513806
O	15.394474	8.929563	11.607187
O	8.574419	4.954980	0.484798
O	10.424560	13.907452	4.521578
O	19.096624	6.077005	9.553161
O	17.258883	14.948614	13.603072
O	24.080595	11.006647	2.526711
O	25.899189	17.892725	9.535254
O	28.396219	13.569438	9.519375
O	21.570780	7.458680	13.612115
O	21.573681	15.316876	2.421936
O	14.719410	13.515518	9.557103
O	17.231369	17.880236	9.564021
O	25.852089	14.964638	13.552376
O	19.097519	11.029943	2.455298
O	24.089596	5.953067	9.518846
Al	20.018539	5.078660	5.446760
Si	11.372663	13.006952	0.469049
Si	5.780824	6.918707	3.014715
Si	14.432160	4.798231	12.087748
Si	9.804864	7.478571	12.040473
Si	16.003338	13.886504	3.019542
Si	7.407979	2.443054	5.536491
Si	18.447073	6.034915	0.446031
Si	16.919769	1.532673	2.971875
Si	14.445229	10.147047	12.113326
Si	8.893228	3.364571	0.488005
Si	11.335955	14.835649	5.500523
Si	20.018847	5.219687	8.524712
Si	17.549189	16.547028	13.593998
Si	23.132456	9.800649	2.010231
Si	25.600792	18.398069	11.045105
Si	28.702520	14.845323	8.559832
Si	20.030195	6.948726	13.597817
Si	23.100330	15.116014	1.912764
Si	14.415392	13.030849	11.077469
Si	16.045113	17.438524	8.551727
Si	27.082623	13.905947	13.550521
Si	18.462156	12.448780	1.983334
Si	24.666464	6.031922	11.037486
Si	23.097765	6.905098	13.568021
Si	14.463902	14.781490	8.568245

Si	28.663282	12.995814	11.010532
Si	20.034409	15.144094	1.948482
Si	24.679289	12.434447	2.013911
Si	18.464991	6.066201	11.046920
Si	27.094172	17.494934	8.508118
Si	16.047901	13.872894	13.578136
Si	17.536543	18.370771	11.078686
Si	20.037148	9.841221	1.874821
Si	25.561089	16.561790	13.565571
Si	23.113729	5.089626	8.544139
Si	14.466385	14.821986	5.516443
Si	16.946974	3.358055	0.467236
Si	11.328282	10.140346	12.020177
Si	8.894701	1.548445	3.007958
Si	5.785756	5.101888	5.499663
Si	14.443054	13.006744	0.461257
Si	11.362377	4.778112	12.089684
Si	20.056017	6.934623	2.942012
Si	18.354769	2.413989	5.500100
Si	7.381803	6.047861	0.445180
Si	15.984082	7.490150	12.074893
Si	9.811477	13.882212	3.020976
Rh	20.076265	7.986488	6.228896
Rh	20.340059	10.618498	6.526121
Rh	22.501871	8.181484	7.920041
Rh	22.043863	9.191220	5.138589
C	20.704185	9.122237	7.688683
C	21.013863	9.092047	9.077915

CH₂C/H₇Rh₄

159

generated by VMD

H	21.236643	10.431285	5.342905
H	19.821512	11.974280	7.422338
H	19.108801	9.244413	5.492539
H	23.114035	9.551440	8.201966
H	22.565308	8.002685	9.036452
H	20.925406	10.034848	9.556094
H	20.337280	8.289629	9.660012
H	22.757421	9.145641	5.979076
H	20.568289	12.036201	6.939983
O	19.139481	16.781506	14.050274
O	19.839617	5.833528	7.058756
O	23.191761	8.575577	3.065553
O	24.100620	18.929102	11.107670
O	25.949938	7.092631	11.075432
O	17.258867	12.789057	3.005023
O	16.683048	17.352356	7.056284
O	26.474552	12.409578	13.930048
O	24.089880	16.009365	2.865283
O	14.804610	11.420337	11.116843
O	10.465375	3.157941	0.012057
O	28.424728	14.298564	7.061208
O	15.448516	3.078274	0.042816
O	14.830736	14.352075	7.047915
O	28.409147	11.425674	11.114861
O	19.156189	16.047161	2.973573
O	8.609732	12.785785	3.011961
O	17.256556	7.092208	11.087654

O	26.484118	17.280575	7.062266
O	16.730001	12.407194	13.942288
O	19.113176	18.908567	11.131584
O	20.065706	8.594536	3.021206
O	24.079874	16.783035	14.105742
O	23.379354	5.732864	7.020602
O	19.887663	19.318821	13.655194
O	21.688402	4.554772	5.291197
O	21.600658	6.480952	2.559108
O	23.336533	19.307966	13.640526
O	26.661459	7.578336	13.608793
O	16.610672	15.345057	2.591085
O	14.850117	16.418442	5.347114
O	28.342455	10.515194	13.624152
O	26.661098	15.313666	2.582914
O	14.845308	10.528426	13.636425
O	16.561186	7.581514	13.617003
O	28.317188	16.338850	5.356937
O	19.623705	3.612118	8.515773
O	7.923699	12.318627	0.467959
O	6.291059	9.240777	0.511345
O	17.991617	4.557951	11.520576
O	12.952843	15.293872	8.697029
O	11.215833	0.626250	0.435766
O	14.615505	0.544716	0.365523
O	12.940532	13.293724	11.496747
O	6.198611	3.563776	8.578095
O	19.585541	9.292803	0.504419
O	17.994413	12.303197	0.470475
O	7.883275	4.563780	11.522707
O	11.013034	13.387965	1.991308
O	18.877382	3.833786	5.169925
O	6.839275	6.354582	1.921517
O	14.850642	6.362987	12.015337
O	11.016166	6.357559	12.001512
O	14.870972	13.449662	1.995735
O	6.937014	3.958261	5.223716
O	19.037687	6.361215	1.897402
O	17.237103	2.751863	2.005994
O	12.932181	9.719389	12.004562
O	8.705836	2.775198	1.993192
O	12.945223	14.584864	5.156126
O	21.604990	5.285259	9.012795
O	17.354637	17.128668	12.087237
O	21.630064	10.358021	1.801670
O	25.825367	17.141314	12.103835
O	27.809124	16.064941	9.017488
O	19.669230	6.524647	12.099784
O	23.544825	13.524916	2.047259
O	15.450033	13.838091	12.081967
O	15.458994	16.040150	9.034722
O	27.768286	13.842932	12.086585
O	19.647318	13.576893	2.074234
O	23.530176	6.526901	12.064452
O	12.952334	12.486901	0.442009
O	19.645941	6.452624	4.461623
O	6.166495	6.365573	4.475854
O	12.935436	4.575465	11.615465
O	10.448209	8.905081	11.564465
O	15.437252	13.928159	4.538188
O	8.640670	2.047526	4.534532

O	17.272451	4.934861	0.507698
O	17.165621	1.907410	4.551060
O	15.422321	8.910213	11.585128
O	8.608300	4.953268	0.514704
O	10.475444	13.845998	4.536319
O	19.120447	6.026865	9.579439
O	17.312889	14.951909	13.597960
O	24.123234	10.981665	2.489466
O	25.955355	17.879131	9.568212
O	28.452909	13.544988	9.555582
O	21.607697	7.452965	13.640610
O	21.615929	15.290783	2.446568
O	14.772985	13.528486	9.544250
O	17.269421	17.900331	9.558836
O	25.876249	14.948578	13.582908
O	19.147524	11.021011	2.514802
O	24.120886	5.983189	9.538936
Al	20.039209	5.048265	5.456053
Si	11.415223	13.003003	0.470224
Si	5.777391	6.908679	3.004646
Si	14.472178	4.785744	12.094757
Si	9.845162	7.481540	12.065279
Si	16.041159	13.881404	3.034785
Si	7.426111	2.447718	5.538256
Si	18.453144	6.044225	0.421408
Si	16.960863	1.495009	3.004033
Si	14.495200	10.146165	12.084943
Si	8.921964	3.361537	0.497959
Si	11.372827	14.775163	5.527770
Si	20.050211	5.189326	8.540490
Si	17.598240	16.550735	13.582825
Si	23.152483	9.804228	1.956153
Si	25.636269	18.381126	11.073036
Si	28.738674	14.809097	8.574768
Si	20.068195	6.937247	13.617583
Si	23.139688	15.092976	1.925616
Si	14.489529	13.018822	11.058136
Si	16.064903	17.472769	8.557522
Si	27.087347	13.872494	13.557603
Si	18.502829	12.432865	2.013988
Si	24.703205	6.041215	11.049963
Si	23.136261	6.898527	13.595286
Si	14.503804	14.807926	8.576585
Si	28.728064	13.023664	11.063668
Si	20.072803	15.140199	1.979255
Si	24.726751	12.415072	2.005804
Si	18.505045	6.042715	11.077006
Si	27.140451	17.469368	8.533500
Si	16.112545	13.865490	13.561926
Si	17.571615	18.382330	11.076872
Si	20.096170	9.835587	1.945080
Si	25.606295	16.549435	13.596038
Si	23.152359	5.152601	8.530638
Si	14.505603	14.830054	5.522960
Si	16.990841	3.332369	0.510358
Si	11.366384	10.142722	12.075111
Si	8.940224	1.545298	3.025454
Si	5.827618	5.126033	5.500608
Si	14.483929	13.014703	0.480918
Si	11.399883	4.784077	12.102923
Si	20.078468	6.935190	2.988782

Si	18.388548	2.365706	5.529382
Si	7.423069	6.053972	0.437547
Si	16.022566	7.484186	12.078347
Si	9.856585	13.841402	3.037296
Rh	19.697086	7.917767	6.326399
Rh	19.822605	10.582612	6.403071
Rh	22.125290	8.503591	7.630044
Rh	21.627258	8.890531	4.866074
C	20.176769	9.198675	7.684670
C	20.673697	9.114378	9.020815