

# Supporting Information

## Direct *n*-octanol amination by ammonia on supported Ni and Pd catalysts: activity is enhanced by “spectator” ammonia adsorbates

Alexandre S. Dumon,<sup>1</sup> Tao Wang,<sup>1</sup> Javier Ibañez,<sup>2,3</sup> Ajay Tomer,<sup>2,3</sup> Zhen Yan,<sup>2</sup> Raphael Wischert,<sup>2</sup> Philippe Sautet,<sup>4</sup> Marc Pera-Titus<sup>2,\*</sup> and Carine Michel<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Univ Lyon, Ens de Lyon, CNRS UMR 5182, Université Claude Bernard Lyon 1, Laboratoire de Chimie, F69342, Lyon, France

<sup>2</sup> Eco-Efficient Products and Processes Laboratory (E2P2L), UMI 3464 CNRS – Solvay, 3966 Jin Du Road, Xin Zhuang Ind. Zone, 201108 Shanghai, China

<sup>3</sup> Univ. Lille, Univ. Artois, CNRS, ENSCL, Centrale Lille, UMR 8181—UCCS—Unité de Catalyse et Chimie du Solide, Bd. Paul Langevin Lille France

<sup>4</sup> Department of Chemical and Biomolecular engineering, University of California, Los Angeles, Los Angeles, CA 90095, United States

\*Corresponding author: [marc.pera-titus-ext@solvay.com](mailto:marc.pera-titus-ext@solvay.com), [carine.michel@ens-lyon.fr](mailto:carine.michel@ens-lyon.fr)

---

### FIGURE CAPTIONS

Figure S1. XRD patterns of unreduced Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts.

Figure S2. H<sub>2</sub>-TPR profiles of (A) Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and (B) Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> samples.

Figure S3. (A) CO-TPD profiles of the Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> samples and (B) H<sub>2</sub>-TPD profile of Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. The low and high-temperature CO desorption peaks on Ni for the Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts can be assigned to molecularly and dissociatively adsorbed CO, respectively, according of refs.<sup>3,4</sup>

Figure S4. Representative HRTEM images and particle size distributions for the metal nanoparticles for (A) 6.5wt.%Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and (B) 1.5wt.%Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Figure S5. Computed Gibbs free energy profiles (in eV) on Pd (top) and Ni (bottom) for the amination of ethanol by ammonia following the H-borrowing mechanism. The reference is the bare metallic slab and the molecules in gas phase. The hydrogen atoms generated by the dehydrogenation steps are kept adsorbed on a separated metallic slab. When adsorbed, the molecular species are tagged with a \*. The rate determining transition state and the rate determining intermediate are shown in red and their structures are reported on the right. The corresponding energetic span is shown with a vertical double arrow and indicated in bold.

Figure S6. Predicted coverage of ammonia on the Pd(111) surface (top panel) and the Ni(111) surface (bottom panel) in function of temperature and partial pressure of ammonia.

## TABLE CAPTIONS

Table S1. Reducibility and metal speciation for Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts as a function of the metal loading.

Table S2. Metal dispersion and mean particle size for Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts.

Table S3. Textural properties of Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts.

Table S4. Deformation energy, interaction energy (2-bodies and 3-bodies) as well as synergic for each fragment (slab, imine and ammonia if needed) on each surface (Pd, Ni and their ammoniated form), in eV.

## RELATIVE ERROR IN THE CATALYTIC TESTS

### Error in the volumetric feed flowrate (F)

Gas mass-flow controllers were calibrated to within <2% error at 95% confidence interval. Liquid feed pump specifications detail an error of 3% on the flowrate.

### Error in GC analysis for concentration (x)

Overall, 10 random samples were prepared following the same experimental protocol as in regular reaction experiments in order to estimate the error on the GC determined concentrations.

The relative error at 95% confidence interval was **1.5% of the detected concentration**.

The FID response of *n*-octanal and di-*n*-octylether were extrapolated from *n*-octylamine and di-*n*-octylamine respectively using the effective carbon number concept. The error was difficult to estimate, but according to the results obtained by Scanlon et al.<sup>1</sup> this should be *ca.* ~5%.

### Error in the mean particle size

The particle size distributions measured by HRTEM were adjusted to a normal distribution and the standard deviation from the mean value was used to determine the 95% confidence interval.

## Propagation of error (confidence intervals)

### Error in molar flowrates (w)

➤ *N*-octanol and calibrated products:

$$w_i = F \rho_G x_i \quad (i = n\text{-octanol, amines}) \quad (\text{S1})$$

$$w_i = \bar{w}_i \pm \bar{w}_i * 1.5\% \quad (\text{S2})$$

➤ *Non-calibrated products*:

$$w_i = F \rho_G x_i \quad (i = \text{octanal, di-}n\text{-octylether}) \quad (\text{S3})$$

$$w_i = \bar{w}_i \pm \bar{w}_i * 5.0\% \quad (\text{S4})$$

### *N*-octanol conversion

$$X = 1 - \frac{w_{C_8-OH} \pm w_{C_8-OH} * 1.5\%}{w_{C_8-OH}^0 \pm w_{C_8-OH}^0 * 3.0\%} \quad (\text{S5})$$

$$X = \bar{X} \pm (1 - \bar{X}) * \sqrt{(1.5\%)^2 + (3.0\%)^2} = \bar{X} \pm (1 - \bar{X}) * 3.4\% \quad (\text{S6})$$

### Yield to calibrated products (amines)

$$Y_i = \frac{w_i \pm w_i * 1.5\%}{w_{C_8-OH}^0 \pm w_{C_8-OH}^0 * 3.0\%} * \left| \frac{\mu_{C_8-OH}}{\mu_i} \right| = \bar{Y}_i \pm \bar{Y}_i * 3.4\% \quad (\text{S7})$$

### Yield to non-calibrated products (octanal, di-*n*-octylether)

$$Y_i = \frac{w_i \pm w_i * 5.0\%}{w_{C_8-OH}^0 \pm w_{C_8-OH}^0 * 3.0\%} \left| \frac{\mu_{C_8-OH}}{\mu_i} \right| = \bar{Y}_i \pm \bar{Y}_i * 5.8\% \quad (S8)$$

Reaction rate of n-octanol conversion

$$TOF_X = \frac{w_{C_8-OH}^0 \pm w_{C_8-OH}^0 * 3.0\% - w_{C_8-OH} \pm w_{C_8-OH} * 1.5\%}{n_M \bar{D}_M \pm n_M \bar{D}_M * 10\%} \quad (S9)$$

$$TOF_X = TOF_X \pm TOF_X * \sqrt{\left( \frac{\sqrt{(w_{C_8-OH}^0 * 3.0\%)^2 + (w_{C_8-OH} * 1.5\%)^2}}{w_{C_8-OH}^0 - w_{C_8-OH}} \right)^2 + 10\%^2}$$

Reaction rate of amine formation

$$TOF_{Y_i} = \frac{\bar{w}_i \pm \bar{w}_i * 3.0\%}{n_M \bar{D}_M \pm n_M \bar{D}_M * 10\%} = TOF_{Y_i} \pm TOF_{Y_i} * 10\% \quad (S10)$$

Reaction rate of non-calibrated product formation (octanal, di-n-octylether)

$$TOF_{Y_i} = \frac{\bar{w}_i \pm \bar{w}_i * 5.0\%}{n_M \bar{D}_M \pm n_M \bar{D}_M * 10\%} = TOF_{Y_i} \pm TOF_{Y_i} * 11\% \quad (S11)$$

## CHEMICAL EQUILIBRIUM FOR N-OCTANOL DEHYDROGENATION

The chemical equilibrium for n-octanol dehydrogenation can be described by the following expression



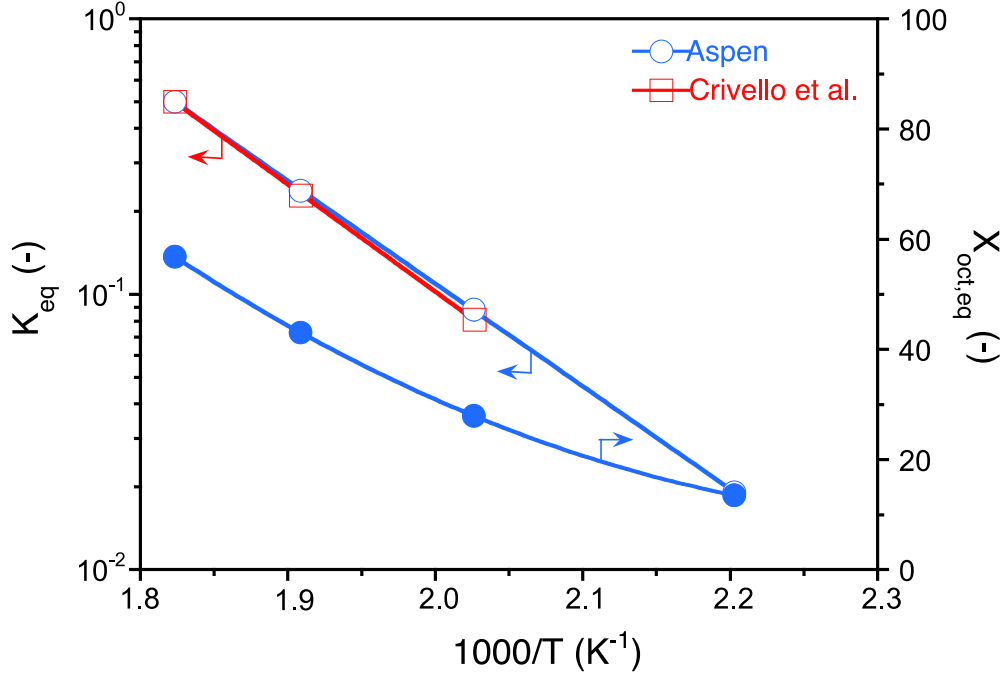
The equilibrium constant for the above reaction was estimated using Aspen<sup>®</sup> software and compared to published data (ref.<sup>2</sup>) (see temperature-evolution below). The equilibrium C<sub>7</sub>-CHO yield was estimated from the equilibrium constants using the following derivation

$$K_{eq} = \frac{(p_{C_7-CHO}/P^0)(p_{H_2}/P^0)}{p_{C_8-OH}/P^0} = \frac{n_{C_7-CHO} n_{H_2}}{n_{C_8-OH} n_T} \frac{P}{P^0} \quad (S13)$$

where P is the total pressure in the reactor, which is assumed as constant and at 1.0 bar, P<sup>0</sup> is the standard pressure (1 bar) and n<sub>T</sub> is the total amount of moles, which can be computed as follows in the absence of carrier gas

$$n_T = n_{C_8-OH} + n_{C_7-CHO} + n_{H_2} \quad (S14)$$

Assuming that Eq. S12 is the sole reaction, Eq. S13 can be rewritten as a function of the octanal yield as follows



Equilibrium constant and C<sub>7</sub>-CHO yield for *n*-octanol dehydrogenation as a function of temperature using Aspen software. For comparison, the equilibrium constants measured experimentally by Crivello et al.<sup>2</sup> have also been plotted.

$$K_{eq} = \frac{Y_{C_7-CHO} Y_{C_7-CHO}}{(1 - Y_{C_7-CHO})(1 + Y_{C_7-CHO})} = \frac{Y_{C_7-CHO}^2}{(1 - Y_{C_7-CHO}^2)} \quad (S15)$$

$$Y_{C_7-CHO} = \sqrt{\frac{K_{eq}}{1 + K_{eq}}} = X_{C_8-OH} \quad (S16)$$

*Estimation of reaction quotients (Q<sub>r</sub>) for the data plotted in Table 2 (main text)*

Given the *n*-octanol conversions and octanal yields listed in Table 2 in the main text, the reaction quotients were computed using the following expression

$$Q_r = \frac{Y_{C_7-CHO} (a + Y_{C_7-CHO})}{(1 - X_{C_8-OH}) [(1 - X_{C_8-OH}) + Y_{C_7-CHO} + (a + Y_{C_7-CHO}) + b]} \quad (S17)$$

where a and b refer to the initial H<sub>2</sub>/*n*-octanol and N<sub>2</sub>/*n*-octanol molar ratios.

The reaction quotients were estimated using Eq. S17 for *n*-octanol dehydrogenation over Ni and Pd both in the presence and absence of hydrogen in the inlet gas stream. In all cases, the reaction quotients were below the equilibrium constant at the same temperature, suggesting that the *n*-octanol conversions and octanal yields measured for the different catalysts both in the presence and absence of hydrogen are far from equilibrium.

Estimation of reaction quotients for *n*-octanol dehydrogenation<sup>a</sup>

Catalyst	Feed (C <sub>8</sub> -OH : NH <sub>3</sub> : H <sub>2</sub> : N <sub>2</sub> )	Conversion (C <sub>8</sub> -OH) (%)	Yield (C <sub>7</sub> -CHO) (%) <sup>a</sup>	Q <sub>r</sub> (-)	Q <sub>r</sub> / K <sub>eq</sub> (%)
6.5wt.%Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.0 : 0.0 : 0.0 : 12.5	28	7.0	5.09x10 <sup>-4</sup>	2.7%
	1.0 : 0.0 : 2.5 : 10.0	14	3.1	6.80x10 <sup>-3</sup>	36%
1.5wt.%Pd/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.0 : 0.0 : 0.0 : 12.5	12	1.0	8.48x10 <sup>-6</sup>	0.05%
	1.0 : 0.0 : 2.5 : 10.0	9	1.1	2.26x10 <sup>-3</sup>	12%

<sup>a</sup> Reaction conditions: 180 °C, 1.6 mL/h *n*-octanol, 8.5 mg metal weight, 155 h<sup>-1</sup> WHSV, ambient pressure

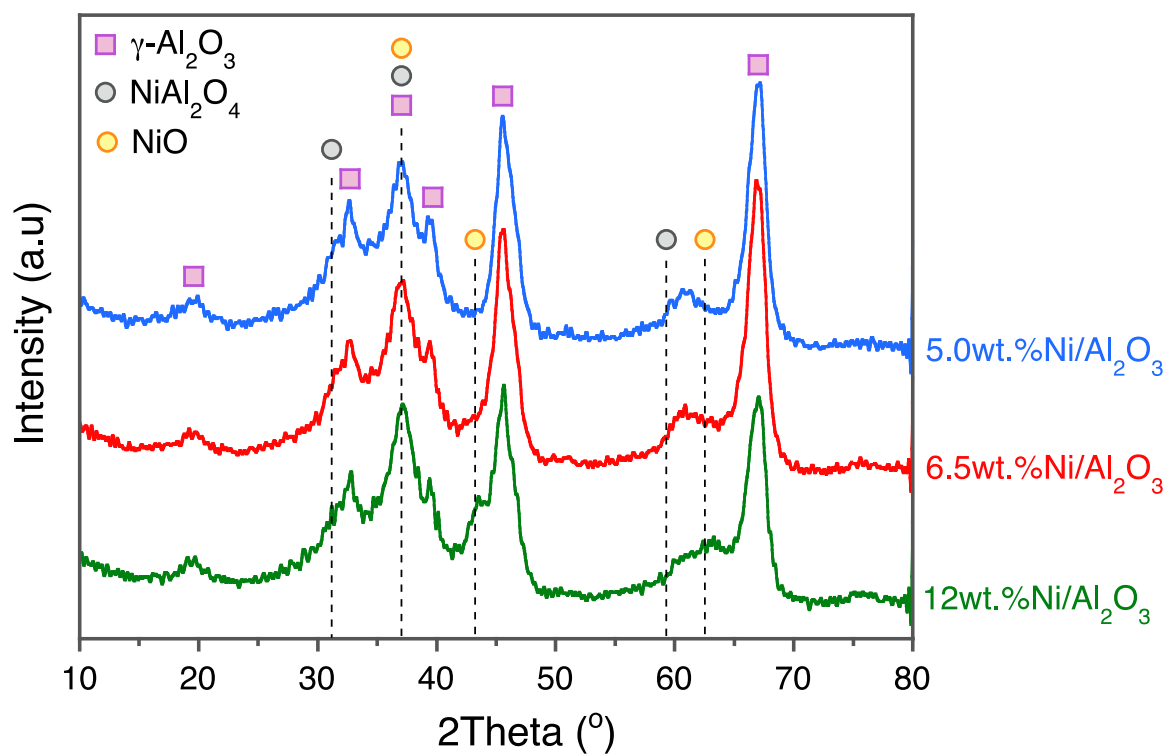


Figure S1. XRD patterns of unreduced Ni/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  catalysts.

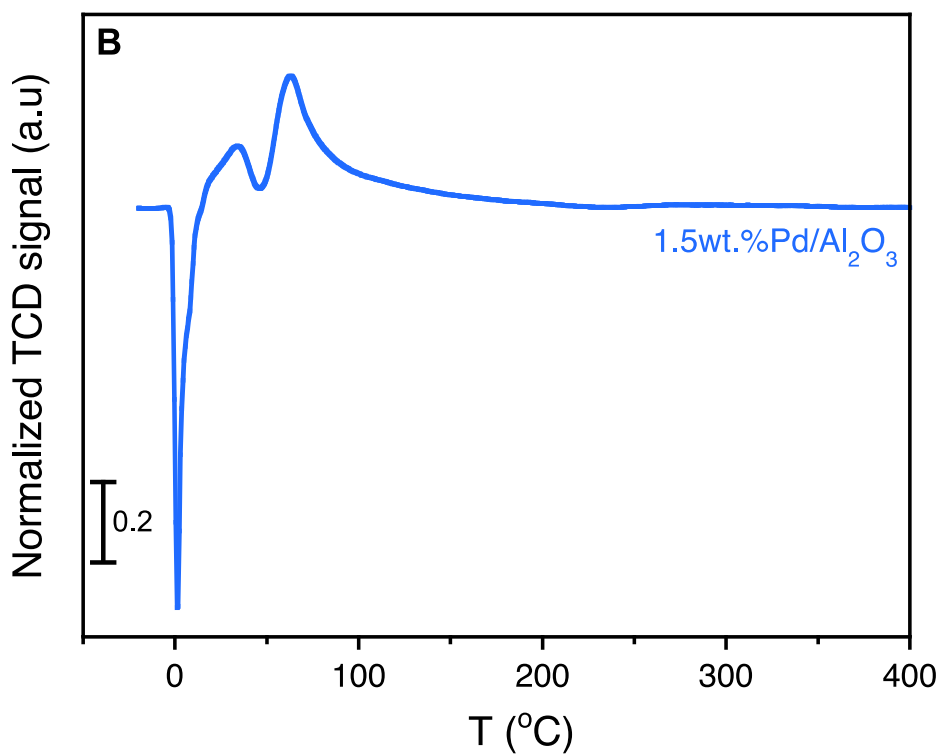
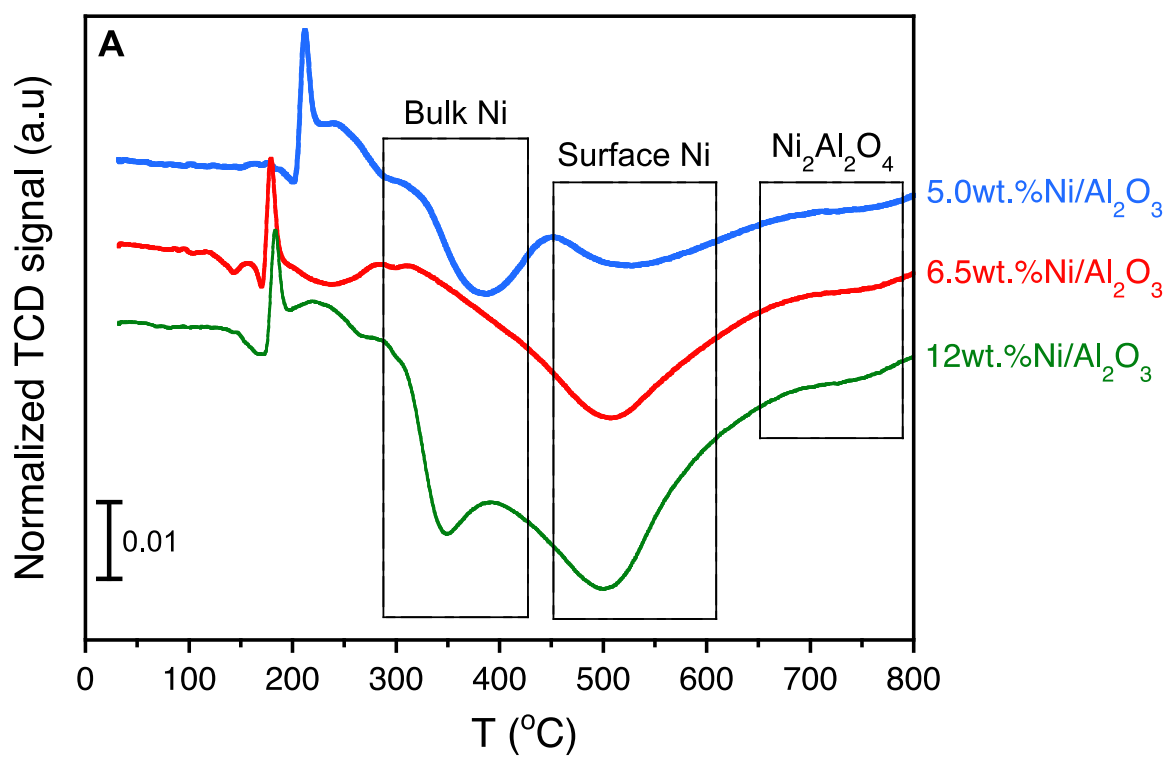


Figure S2.  $\text{H}_2$ -TPR profiles of (A) Ni/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  and (B) Pd/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  samples.



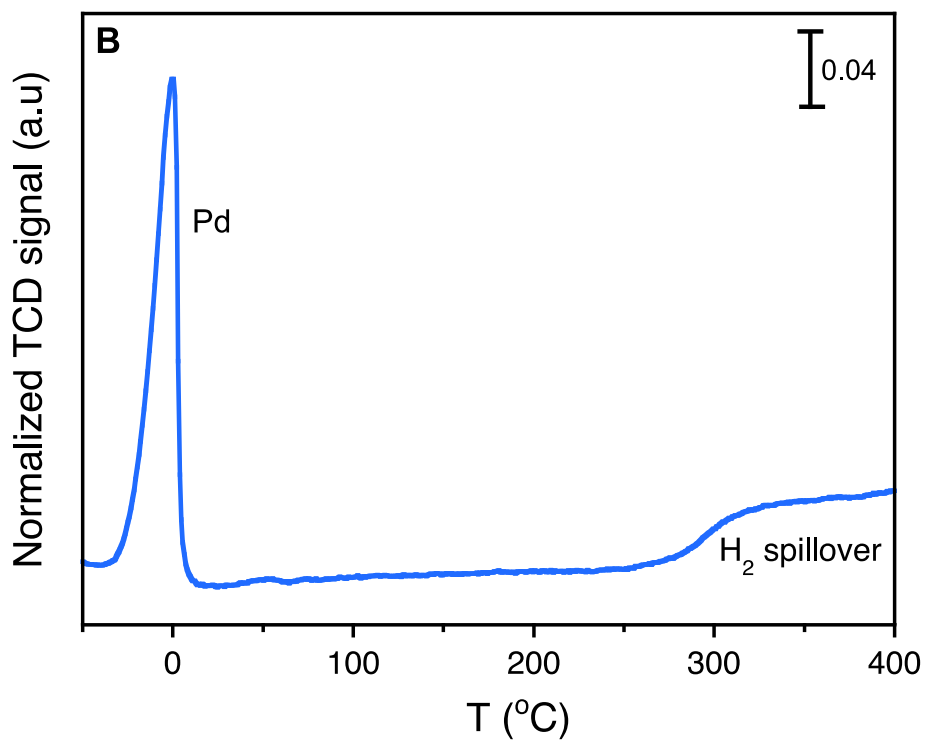
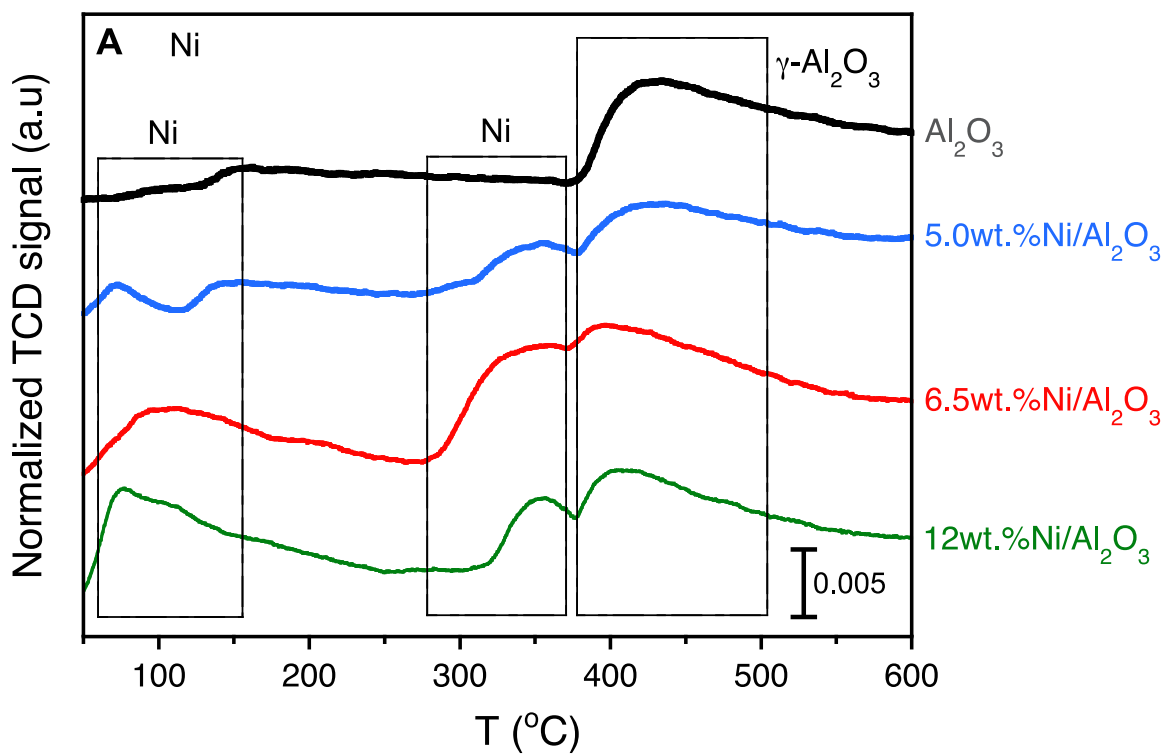


Figure S3. (A) CO-TPD profiles of the Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> samples and (B) H<sub>2</sub>-TPD profile of Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. The low and high-temperature CO desorption peaks on Ni for the Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts can be assigned to molecularly and dissociatively adsorbed CO, respectively, according to refs.<sup>3,4</sup>

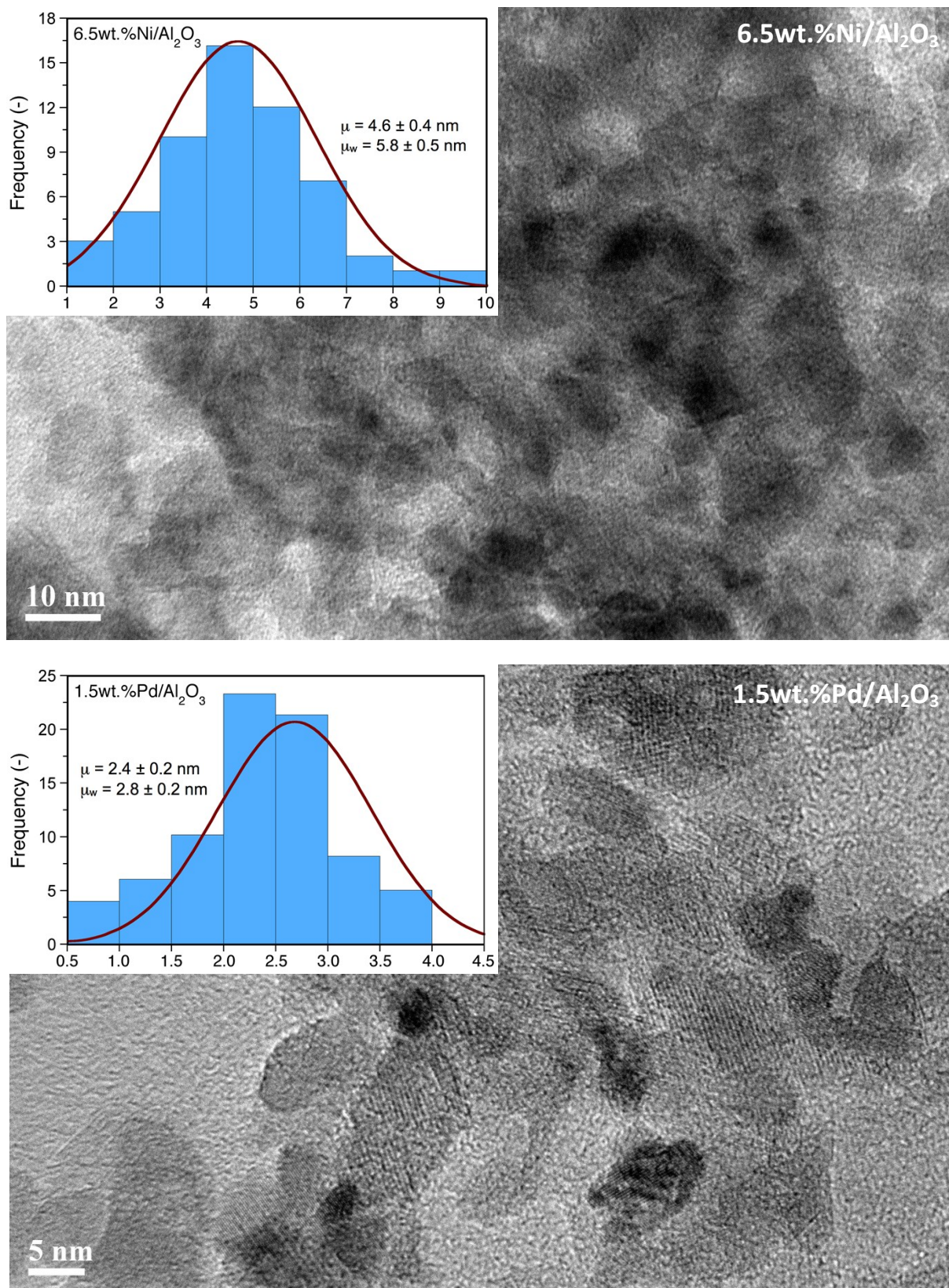


Figure S4. Representative HRTEM images and particle size distributions for the metal nanoparticles for (A) 6.5wt.%Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and (B) 1.5wt.%Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. The term ' $\mu_w$ ' refers to surface weighted mean particle size.

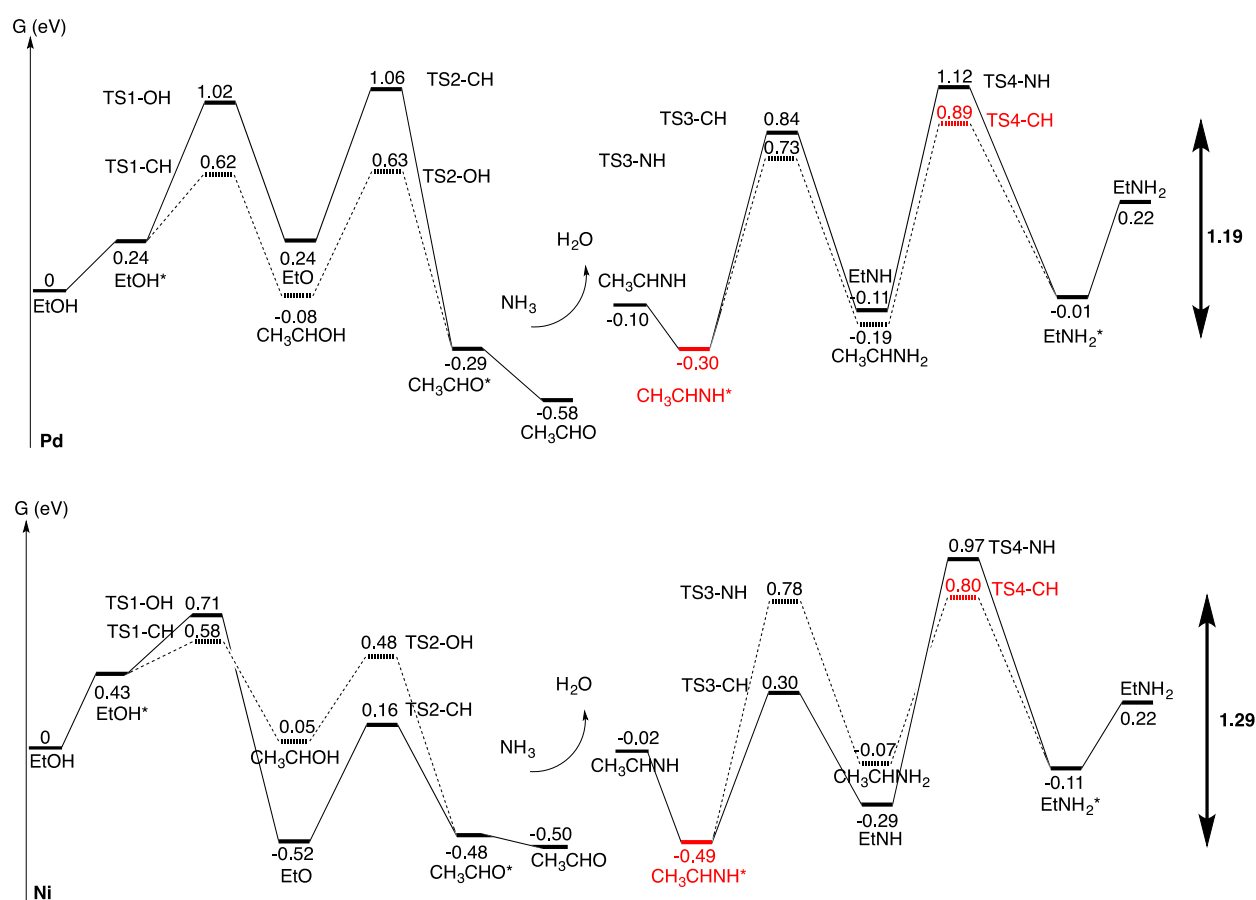


Figure S5. Computed Gibbs free energy profiles (in eV) on Pd (top) and Ni (bottom) for the amination of ethanol by ammonia following the H-borrowing mechanism. The reference is the bare metallic slab and the molecules in gas phase. The hydrogen atoms generated by the dehydrogenation steps are kept adsorbed on a separated metallic slab. When adsorbed, the molecular species are tagged with a \*. The rate determining transition state and the rate determining intermediate are shown in red. The corresponding energetic span is shown with a vertical double arrow and indicated in bold.

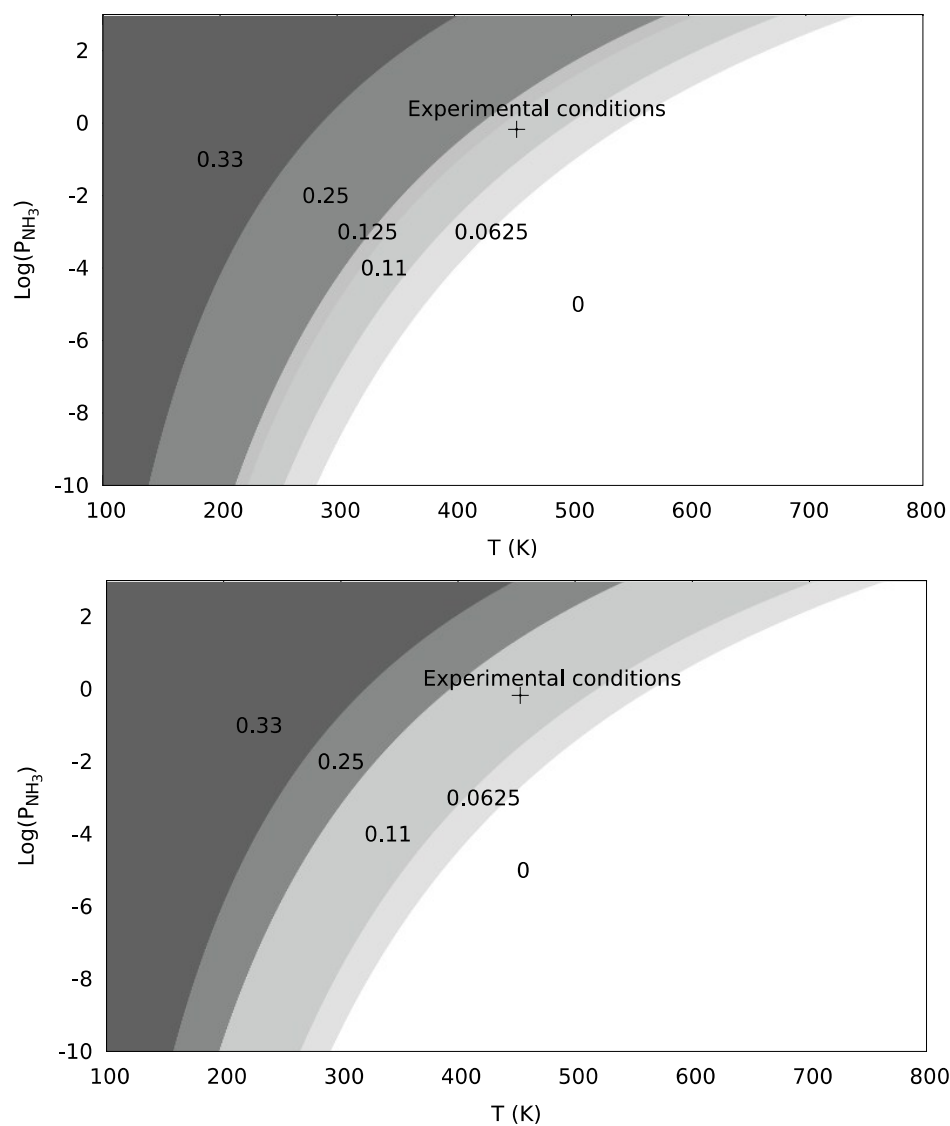


Figure S6. Predicted coverage of ammonia on the Pd(111) surface (top panel) and the Ni(111) surface (bottom panel) in function of temperature and partial pressure of ammonia.

Table S1. Reducibility and metal speciation for Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts as a function of the metal loading.

Metal	Metal loading (wt.%)	Reducibility (until 900 °C)			Ni speciation*					
		H <sub>2</sub> uptake (theo) (μmol/g)	H <sub>2</sub> uptake (exp) (μmol/g)	Reduction (%)	T <sub>bulk</sub> (°C)	%Ni bulk	T <sub>surf</sub> (°C)	%Ni surf	T <sub>alum</sub> (°C)	%Ni alum
Ni	5.0	852	852	100	385	36	505	55	750	9
	6.5	1107	1109	100	-	0	507	90	810	7
	12.0	2044	2002	98	350	20	502	75	810	5
Pd	1.5	140	138	99	-	-	1.3 / 48	100	-	-

\* Nomenclature: surf = surface, alum = Ni aluminate (Ni<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)

Table S2. Metal dispersion and mean particle size for Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts.

Metal	Metal loading (wt.%)	Total CO uptake (μmol/g)	CO uptake by metal (μmol/g)	Metal dispersion (%)	Mean particle size (nm) <sup>b</sup>
-	-	82	-	-	-
Ni	5.0	134	51	12.0	8.4
	6.5	185	102	18.4	5.5
	12.0	166	83	8.1	12.4
Pd	1.5	-	35 <sup>a</sup>	44	3.0

<sup>a</sup> Measured by H<sub>2</sub>-TPD from -50 °C to 40 °C after reduction at 200 °C for 2 h

<sup>b</sup> Measured by assuming a spherical shape for Ni particles and considering S.F. of Ni/CO=2

Table S3. Textural properties of Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts

Metal	Metal loading (wt.%)	S <sub>BET</sub> (m <sup>2</sup> /g)	Pore volume (cm <sup>3</sup> /g) <sup>a</sup>	Mean pore size (nm) <sup>b</sup>
-	-	150	0.528	9.9
Ni	5.0	142	0.469	9.7
	6.5	138	0.453	9.5
	12.0	139	0.419	9.2
Pd	1.5	156	0.536	9.7

<sup>a</sup> Measured from the N<sub>2</sub> desorption branch at P/P<sub>0</sub>=0.99

<sup>b</sup> Measured by the BJH method from the N<sub>2</sub> desorption branch

Table S4. Decomposition of the adsorption energy of the imine into deformation energy, interaction energy (2-bodies and 3-bodies) as well as synergy, on each surface (Pd, Ni and their ammoniated form). The energies are reported in eV.

	Ni-NH <sub>3</sub>	Pd-NH <sub>3</sub>	Ni	Pd
Imine deformation	2.44	0.60	1.27	0.46
Slab deformation	0.16	0.08	0.13	0.05
NH <sub>3</sub> deformation	0.01	0.02	-	-
Imine-NH <sub>3</sub> interaction	-0.04	-0.13	-	-
Imine-Metal interaction	-3.79	-1.78	-2.75	-1.67
NH <sub>3</sub> -Metal interaction	-1.04	-1.03	-	-
3-bodies interaction	-4.71	-2.91	-	-
Synergy	0.16	0.02	-	-

### COMPUTED STRUCTURES provided in the VASP format.

The cartesian coordinates of the cell vectors (3<sup>rd</sup> line to 5<sup>th</sup> line) have to be scaled by a scaling factor (2<sup>nd</sup> line, 2.786 for Pd) to be provided in Å. The coordinates of the atoms are provided in direct coordinates. The type of atom and the number of each type are indicated in the 6<sup>th</sup> and 7<sup>th</sup> line. The Pd and then Ni structures are listed.

Pd(111) slab. Energy = -186.39601 eV

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd  
36

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.2199618785516609 T T T  
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.2199618785516609 T T T  
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.2199618785516609 T T T  
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.2199618785516609 T T T

0.555555555555571	0.444444444444429	0.2199618785516609	T	T	T
0.888888888888857	0.444444444444429	0.2199618785516609	T	T	T
0.555555555555571	0.777777777777786	0.2199618785516609	T	T	T
0.888888888888857	0.777777777777786	0.2199618785516609	T	T	T
0.222222222222214	0.777777777777786	0.2199618785516609	T	T	T
0.000000000000000	-0.000000000000000	0.3300490483088866	T	T	T
0.333333333333357	-0.000000000000000	0.3300490483088866	T	T	T
0.666666666666643	0.000000000000000	0.3300490483088866	T	T	T
0.333333333333357	0.333333333333357	0.3300490483088866	T	T	T
0.666666666666643	0.333333333333357	0.3300490483088866	T	T	T
0.000000000000000	0.333333333333357	0.3300490483088866	T	T	T
0.333333333333357	0.666666666666643	0.3300490483088866	T	T	T
0.666666666666643	0.666666666666643	0.3300490483088866	T	T	T
0.000000000000000	0.666666666666643	0.3300490483088866	T	T	T

Pd\_H<sub>2</sub>O slab. Energy = -201.03422 eV

2.786000000000000		
3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495336

Pd O H  
36 1 2

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2240451130504977	0.1125697162292369	0.2199732890443627	T	T	T
0.5571191658809218	0.1120214632397869	0.2197362376064620	T	T	T
0.8903504741145352	0.1121059740284911	0.2196873322564541	T	T	T
0.2241813130288568	0.4457095184734286	0.2199514489742318	T	T	T
0.5570074240824384	0.4455386740476910	0.2199032922665861	T	T	T
0.8909415028367994	0.4464796257618475	0.2202690367058212	T	T	T
0.5570711790503313	0.7791618926557157	0.2197328110923675	T	T	T
0.8911029440494227	0.7786113090172775	0.2203777794724792	T	T	T
0.2222544010342789	0.7782311643643929	0.2206363113348535	T	T	T

0.0031833686793243	0.0038982573173500	0.3297484100800066	T	T	T
0.3383510400589823	0.0041159237985004	0.3298264282724030	T	T	T
0.6704512955682955	0.0028328076960527	0.3302147000744088	T	T	T
0.3369908482127070	0.3362471358663265	0.3301250408501842	T	T	T
0.6690571966744753	0.3349530673859184	0.3295329702756792	T	T	T
0.0034053189034483	0.3349769108438801	0.3296405827507115	T	T	T
0.3381053116432613	0.6693586681341387	0.3298341648397261	T	T	T
0.6689252715793698	0.6692569831426989	0.3295821122764960	T	T	T
0.0051455977277853	0.6709818002024821	0.3323362087276943	T	T	T
0.9728481878317871	0.6402994471273784	0.4466695074067190	T	T	T
0.8490510364880305	0.6254985363048577	0.4492141299943090	T	T	T
0.9522562561455737	0.5142776142533061	0.4493375641013519	T	T	T

Pd\_NH<sub>3</sub> slab. Energy = -206.91849 eV .

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd N H  
36 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226964684894809	0.1126488103776297	0.2212791850530565	T	T	T
0.5552654384822552	0.1105319222748698	0.2199336463984035	T	T	T
0.8880588510606646	0.1104620829012248	0.2199395846863414	T	T	T
0.2227072153856452	0.4430540700751427	0.2212680865648873	T	T	T
0.5531432505808822	0.4430270041554606	0.2212205257045221	T	T	T
0.8885177461645839	0.4442314043404898	0.2196053565598621	T	T	T



0.5552063496865016	0.7776563949942177	0.2199110423419139	T	T	T
0.8886041555101230	0.7773943853323906	0.2196172985952627	T	T	T
0.2217162453916507	0.7772968054379835	0.2196236771205619	T	T	T
0.9972959058376932	0.9972627638808389	0.3297550284309508	T	T	T
0.3320279240056017	0.9972947141817640	0.3296732489374499	T	T	T
0.6655527814415707	0.9990399210907682	0.3301637135945547	T	T	T
0.3320025328711700	0.3322419652400115	0.3354109929182931	T	T	T
0.6673037129970402	0.3326660503903475	0.3296936333480923	T	T	T
0.9972426241854986	0.3326206840359497	0.3296567689519957	T	T	T
0.3320160687460219	0.6671969544488925	0.3297237727959372	T	T	T
0.6671991905142974	0.6671411457760775	0.3296195995993993	T	T	T
0.9989508479359944	0.6657921160789022	0.3302266988371909	T	T	T
0.3305147024048926	0.3310393943050735	0.4396756658824315	T	T	T
0.4309488066756663	0.4567709450600465	0.4566708632439842	T	T	T
0.3553626636489691	0.2299544069627255	0.4562869769147598	T	T	T
0.2041711496663098	0.3055245260397143	0.4560755025453093	T	T	T

Pd\_MeOH slab. Energy = -217.17832 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F

0.2233347740464359	0.1105207861322665	0.2196432281050102	T	T	T
0.5566364161051505	0.1107552686268306	0.2195380021841748	T	T	T
0.8905685002959040	0.1113627303660562	0.2199531641794071	T	T	T
0.2233233173378085	0.4442534202384935	0.2198206612793076	T	T	T
0.5575500542340480	0.4454663370063396	0.2203314231903381	T	T	T
0.8906753081639922	0.4444359603405192	0.2198949816454046	T	T	T
0.5573046066579141	0.7772499446835014	0.2203885538295386	T	T	T
0.8885337361930645	0.7767639032298427	0.2208134025694843	T	T	T
0.2234598671043076	0.7780225363419951	0.2196403478183781	T	T	T
0.0046378605405331	0.0011329955446025	0.3298879125688772	T	T	T
0.3365327067454434	-0.0003211622841368	0.3301830503706420	T	T	T
0.6694082644618199	0.0006530698114109	0.3295333817194467	T	T	T
0.3349148409641306	0.3317691951527262	0.3291938580851045	T	T	T
0.6698358334737310	0.3315781444804816	0.3292893856612663	T	T	T
0.0031565701870730	0.3330955797059906	0.3301709921163734	T	T	T
0.3349008530330461	0.6662243993523816	0.3296071836820822	T	T	T
0.6715899210737760	0.6669570760199959	0.3325505531208505	T	T	T
0.0048296696565235	0.6664935273072573	0.3299458131353550	T	T	T
0.6156995719181092	0.5046474556513177	0.4793048204124022	T	T	T
0.6398216877984836	0.6659692803951252	0.4445943297965379	T	T	T
0.5218178093411538	0.6645603571672895	0.4440488981446157	T	T	T
0.5881284644973581	0.5151270196596609	0.5312526563478860	T	T	T
0.5028809650239916	0.3768374049092164	0.4578217455430152	T	T	T
0.7459936246165364	0.5041254884883634	0.4741061995544210	T	T	T

Ni (111) slab. Energy = -193.96491 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni

36

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F

0.1111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1092407258037437	T	T	T
0.2219353290617835	0.1105373247902384	0.2198799294953758	T	T	T
0.5555371382394365	0.1111019024530575	0.2201061850048489	T	T	T
0.8888980975469425	0.1111019024530575	0.2201061850048489	T	T	T
0.222211601831536	0.4444389134249125	0.2200592089096788	T	T	T
0.5555610865750875	0.4444389134249125	0.2200592089096788	T	T	T
0.8888980975469425	0.4444628617605634	0.2201061850048489	T	T	T
0.5555610865750875	0.7777888398168463	0.2200592089096788	T	T	T
0.8894626752097619	0.7780646709382163	0.2198799294953758	T	T	T
0.2219353290617835	0.7780646709382163	0.2198799294953758	T	T	T
0.0000494387502388	0.9999505612497614	0.3288803612833184	T	T	T
0.3332344558328580	0.9999505612497614	0.3288803612833184	T	T	T
0.6666478254552931	-0.0000376824227426	0.3289849099778994	T	T	T
0.3333142077301022	0.3332950821268618	0.3288621684355970	T	T	T
0.6666478254552931	0.3333521745447070	0.3289849099778994	T	T	T
0.0000376824227425	0.3333521745447070	0.3289849099778994	T	T	T
0.3333142077301022	0.6666857922698978	0.3288621684355970	T	T	T
0.6667049178731385	0.6666857922698978	0.3288621684355970	T	T	T
0.0000494387502388	0.6667655441671418	0.3288803612833184	T	T	T

Ni\_H<sub>2</sub>O slab. Energy = -208.62471 eV.

2.484300000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495345

Ni O H

36 1 2

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F

0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2221067927978790	0.1109716825530753	0.2202692517323523	T	T	T
0.5553568229147642	0.1106343567055510	0.2198793071852214	T	T	T
0.8885157557853726	0.1106512952452222	0.2198404532473490	T	T	T
0.2222311004816879	0.4444362476737119	0.2199679994676307	T	T	T
0.5553632410254581	0.4442623560467959	0.2199692460534723	T	T	T
0.8898071008651931	0.4463074333460270	0.2214761667553674	T	T	T
0.5553888067463358	0.7780829309324173	0.2198477822527557	T	T	T
0.8898737015260642	0.7766566892190723	0.2216412335682152	T	T	T
0.2195721567664419	0.7763887108638104	0.2218825319911793	T	T	T
0.0000259767485438	0.0018800236061102	0.3288594362477515	T	T	T
0.3351763211396937	0.0018864090860984	0.3289846989332114	T	T	T
0.6669389599508094	-0.0003249018824331	0.3291033919569201	T	T	T
0.3334106022470620	0.3334308597469978	0.3296847922131705	T	T	T
0.6638953964974792	0.3309025010201997	0.3283842507324800	T	T	T
0.0003385204211805	0.3306759382104195	0.3283136367221330	T	T	T
0.3349877755747573	0.6657681765645190	0.3287751984420679	T	T	T
0.6634886639873581	0.6659047764905639	0.3283645128874923	T	T	T
0.0002431471469256	0.6668297938801693	0.3357548408844059	T	T	T
0.9873566837394054	0.6539110336026733	0.4533445756289677	T	T	T
0.8517355241701665	0.6403579646797520	0.4632067693436495	T	T	T
0.9694923183988675	0.5165199659948201	0.4631387295145209	T	T	T

Ni\_NH<sub>3</sub> Slab. Energy = -214.45294 eV.

2.484300000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495345

Ni N H

36 1 3

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F

0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F F F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F F F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F F F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F F F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F F F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F F F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F F F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F F F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F F F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F F F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F F F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F F F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F F F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F F F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F F F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F F F
0.2231574984403721	0.1138911756994645	0.2220633307877975	T T T
0.5549231254354083	0.1107017560717267	0.2199240039098171	T T T
0.8882333292948061	0.1105162538929960	0.2199406088187885	T T T
0.2230910105734765	0.4421183297100626	0.2220795948048035	T T T
0.5518393598014484	0.4423089103146793	0.2220145475285449	T T T
0.8884671726640718	0.4443500132686253	0.2198423820689612	T T T
0.5548767293673507	0.7771320102389581	0.2199644706611537	T T T
0.8886211141741995	0.7772368929302829	0.2198459328121203	T T T
0.2213776212546890	0.7770111742644730	0.2198810196580965	T T T
0.9957113830985804	0.9966909866835465	0.3285095525838457	T T T
0.3324450141533575	0.9963515080856382	0.3283550283649674	T T T
0.6651230085037341	0.9987938285728362	0.3295329167551273	T T T
0.3321552691547254	0.3323271712240370	0.3396038365924454	T T T
0.6673827294811190	0.3317158292543780	0.3285658568217400	T T T
0.9955677002684524	0.3316020913269568	0.3284115402975090	T T T
0.3324777570924056	0.6679522165100806	0.3285916116041605	T T T
0.6674748690657140	0.6680991244338230	0.3284429336104253	T T T
0.9986466871169526	0.6656174796910364	0.3291258858866755	T T T
0.3318613056692996	0.3320865115101057	0.4505868483108486	T T T
0.4436532151274974	0.4729151536443297	0.4703402845658431	T T T
0.3607852376156586	0.2201041276179083	0.4702227136810109	T T T
0.1908529256187705	0.3029716514475567	0.4701810530164536	T T T

Ni\_MeOH slab. Energy = -224.80428 eV.

2.484300000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H  
36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2220030151306698	0.1099912341480629	0.2199752501399334	T	T	T
0.5551175758350904	0.1102585884814192	0.2198216183837551	T	T	T
0.8887182595842220	0.1100557004875772	0.2202201329721360	T	T	T
0.2221707597965920	0.4436388678319321	0.2199643031614454	T	T	T
0.5565540552620712	0.4458420618932915	0.2216998321601408	T	T	T
0.8889170245437514	0.4437289414014814	0.2199895950001853	T	T	T
0.5562737361833099	0.7757891155759046	0.2215455026805083	T	T	T
0.8861133311768118	0.7754791307306373	0.2219385914038633	T	T	T
0.2221788657708215	0.7774248806620386	0.2198292202611004	T	T	T
0.0016908395108059	0.0007237365840343	0.3290086887515219	T	T	T
0.3333756766588097	-0.0014566779102914	0.3292012114882547	T	T	T
0.6665685361303293	0.0006358970690157	0.3284685132082047	T	T	T
0.3305452147327201	0.3298179206876549	0.3284055362438285	T	T	T
0.6673756021741243	0.3295758605500740	0.3282789971250678	T	T	T
0.0002407607266253	0.3320060826082108	0.3294115249682622	T	T	T
0.3305073147114106	0.6645576107541759	0.3284087896541939	T	T	T
0.6673704390198630	0.6648402529544573	0.3361346246392855	T	T	T
0.0025076208332026	0.6646972480965342	0.3286261806733421	T	T	T
0.6331968234270019	0.5100482353454661	0.4964946949448619	T	T	T
0.6621383189173731	0.6828176960931076	0.4515606763711177	T	T	T
0.5440552007153505	0.7048976391979106	0.4582263932139563	T	T	T
0.6351971045509310	0.5492548553314459	0.5547081066152530	T	T	T
0.4876417434586671	0.3682717826206587	0.4824234983823368	T	T	T
0.7641295630651425	0.4865943793254877	0.4842436519392392	T	T	T

H@Pd. Energy = -190.46551 eV.

2.786000000000000

3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000

-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000

0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

H Pd

1 36

Selective dynamics

Direct

0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.3699421133084917	T	T	T
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2222504723899631	0.1110828609433729	0.2198147017738832	T	T	T
0.5556946726710628	0.1113893453421225	0.2200746964480049	T	T	T
0.8888323885533983	0.1110828609433729	0.2198147017738832	T	T	T
0.2222504723899631	0.4445009447799333	0.2198147017738832	T	T	T
0.5557042931725334	0.4445188132529346	0.2204944310174443	T	T	T
0.8888145200803919	0.4445188132529346	0.2204944310174443	T	T	T
0.5556946726710628	0.7776386606622729	0.2200746964480049	T	T	T
0.8888145200803919	0.7776290401608023	0.2204944310174443	T	T	T
0.2219439879912128	0.7776386606622729	0.2200746964480049	T	T	T
0.0007731216586542	0.0015462433173085	0.3298619311649458	T	T	T
0.3333126671226341	0.0000206662107008	0.3299011251004910	T	T	T
0.6667079990880888	0.0000206662107008	0.3299011251004910	T	T	T
0.3317870900160252	0.3325602116746812	0.3298619311649458	T	T	T
0.6650571321565761	0.3301142643131628	0.3316380773533904	T	T	T
0.0007731216586542	0.3325602116746812	0.3298619311649458	T	T	T

0.3333126671226341 0.6666253342452398 0.3299011251004910 T T T  
0.6650571321565761 0.6682762011767525 0.3316380773533904 T T T  
0.0032190690201737 0.6682762011767525 0.3316380773533904 T T T

H@Ni. Energy = -197.93376 eV.

2.48430000000000  
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni H

36 1

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2225344317318832 0.1117009366464499 0.2208976068558835 T T T  
0.5551950922200850 0.1109221038461451 0.2203894480112268 T T T  
0.8890895881069276 0.1109104118930704 0.2203975671702075 T T T  
0.2223196814690127 0.4444841926858822 0.2203833720141305 T T T  
0.5554978740784166 0.4445021259215827 0.2203757941172802 T T T  
0.8890778961538542 0.4448049077799175 0.2203894480112268 T T T  
0.5555158073141178 0.7776803185309870 0.2203833720141305 T T T  
0.8882990633535497 0.7774655682681181 0.2208976068558835 T T T  
0.2224767228758743 0.7775232771241228 0.2208765865703324 T T T  
0.0000962578315215 0.9999037421684778 0.3295634924916499 T T T  
0.3332676685528412 0.9999030790817339 0.3295539750273541 T T T  
0.6676160692588612 0.0018357575698873 0.3293365253479510 T T T  
0.3325634693091194 0.3317136433554291 0.3309184630905599 T T T



0.6676262310630207	0.3323737689369775	0.3293204982647854	T	T	T
0.9981642424301127	0.3323839307411394	0.3293365253479510	T	T	T
0.3325778742080968	0.6674221257919043	0.3309250105873145	T	T	T
0.6682863566445688	0.6674365306908787	0.3309184630905599	T	T	T
0.0000969209182658	0.6667323314471617	0.3295539750273541	T	T	T
0.4444713229656053	0.5555275770343880	0.3804089115653845	T	T	T

H@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -210.97666 eV.

```

2.786000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336

```

```

Pd N H
36  1  4

```

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2221836761795695	0.1124596359729939	0.2211767897867534	T	T	T
0.5552097020668192	0.1105076280048122	0.2194119510204292	T	T	T
0.8883350618630527	0.1102407047836404	0.2199742333149736	T	T	T
0.2225758166991245	0.4429101918456327	0.2210989729657706	T	T	T
0.5529732776085912	0.4432084267873753	0.2211474712418733	T	T	T
0.8887936323515258	0.4443481629430147	0.2196803404170046	T	T	T
0.5550605749187557	0.7771420974355787	0.2199685959310059	T	T	T
0.8884991590943924	0.7772111941465973	0.2205961978522185	T	T	T
0.2210942107944328	0.7766128078710832	0.2197391857600075	T	T	T
0.9984094059254157	1.0001440399035815	0.3317842764855122	T	T	T
0.3328456613737382	0.9976176364331758	0.3290137212896835	T	T	T

0.6646583784408271	0.9993892082899711	0.3295322827881799	T	T	T
0.3315999293828374	0.3321844607950436	0.3349497527482868	T	T	T
0.6663307065421459	0.3311928089690169	0.3290625715065912	T	T	T
0.9970017865730065	0.3323144690435526	0.3295773119887115	T	T	T
0.3316308122083867	0.6667888232138266	0.3296228503200381	T	T	T
0.6638339418961033	0.6655461010442573	0.3316168018783447	T	T	T
1.0000862836841986	0.6638208871867959	0.3324567237133011	T	T	T
0.3306876616022731	0.3309861221606363	0.4391636481981442	T	T	T
0.4316097585701519	0.4568627193950374	0.4558650162181385	T	T	T
0.3553475551035370	0.2297628170080434	0.4557136827135863	T	T	T
0.2044957553741901	0.3058761086868678	0.4555516726905200	T	T	T
0.8869353849278080	0.7762006849534044	0.3708038521733627	T	T	T

H@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -218.43879 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni N H

36 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2222542557803103	0.1127911428383162	0.2216556289430035	T	T	T
0.5549731285677987	0.1106485576650574	0.2198621216896972	T	T	T
0.8884866250894617	0.1102698293111571	0.2199897212387255	T	T	T
0.2227864737047494	0.4421923182596512	0.2214612187082376	T	T	T
0.5523830777562849	0.4429978135945661	0.2216999603167502	T	T	T

0.8886666149956091	0.4447556224841218	0.2198396028763279	T	T	T
0.5547886523045411	0.7766602590270564	0.2200238468840222	T	T	T
0.8882756415155858	0.7770149130769185	0.2197297965884035	T	T	T
0.2206172038669580	0.7764592298119672	0.2198428583280635	T	T	T
0.9964636044924055	0.9975048669347982	0.3299291886993349	T	T	T
0.3342278716153225	0.9965720496047276	0.3278453055660051	T	T	T
0.6643293970967160	0.9993799698856106	0.3292036360900227	T	T	T
0.3314303828107820	0.3321771738341209	0.3370065837789770	T	T	T
0.6666131651128395	0.3293147303191081	0.3280296412676056	T	T	T
0.9958242625794741	0.3322208917789189	0.3278810912937019	T	T	T
0.3315674032002603	0.6673235762975234	0.3281100232669580	T	T	T
0.6663735328926029	0.6674938687040066	0.3300060308039123	T	T	T
0.9989104120956072	0.6650923806693702	0.3309626207343473	T	T	T
0.3316647080010129	0.3316428827913108	0.4470853068057968	T	T	T
0.4445762296512633	0.4726296445801226	0.4663150907847541	T	T	T
0.3597775841892778	0.2188576450130355	0.4663719875616543	T	T	T
0.1907719982359599	0.3035023409130244	0.4663956284001374	T	T	T
0.8867569523874195	0.7765095524826860	0.3811340231223829	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH, gas phase. Energy = -27.393271 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

C N H

1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.4448724247167846	0.5491364969563435	0.4609698275751271	T	T	T
0.5212698198801675	0.7072364758283882	0.4335051552706020	T	T	T
0.3857088835017137	0.4251045074797588	0.4299841763654868	T	T	T
0.4326663623182299	0.5254744235935220	0.5143015002503617	T	T	T
0.5708274073236197	0.8114901980696629	0.4679383389750456	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>, gas phase. Energy = -35.663777 eV.

1.0000000000000000

15.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	15.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	15.0000000000000000

N C H

1 1 5

Direct

0.0629136000603197 0.0798588267781000 0.9871249368985815  
0.0062273624486764 0.0012559260187146 0.9998917451793332  
0.0425702992735140 0.9515163952360339 0.0396979312263994  
0.9468115786170515 0.0203496807057988 0.0384120744816059  
0.9832760051762719 0.9681439907358822 0.9379976835378372  
0.0302073506438703 0.1271510521776165 0.9504894287861063  
0.1188004704469634 0.0634654616811900 0.9516768665568094

CH<sub>3</sub>CHNH, gas phase. Energy = -44.324014 eV.

2.786000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

N C H

1 2 5

Selective dynamics

Direct

0.4879005083954604 0.3713694569669908 0.4134486903825193 T T T  
0.5719829383492314 0.2969076317324910 0.4409662676602554 T T T  
0.4695317285891732 0.1172739330262186 0.4764049606679246 T T T  
0.5021349279022628 0.0155217388555466 0.4553453823142251 T T T  
0.5134394722129499 0.1345671137576129 0.5279282533534290 T T T  
0.3200471334553047 0.0635488547739712 0.4738850331099437 T T T  
0.7243626754473111 0.3601656997401356 0.4401350510818288 T T T  
0.5807739142867021 0.4941082092863952 0.3914113146550695 T T T

CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, phase gas. Energy = -52.327744 eV.

1.000000000000000

10.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 10.0000000000000000 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 10.0000000000000000

C H N

2 7 1

Direct

0.0317008204871837 0.0169664569657287 0.0785064567734983  
0.1300961043193662 0.0499406746153126 0.9673269756419134  
0.9550901680831919 0.9474908821597263 0.0404473517268492  
0.0852297379261149 0.9638126962331975 0.1598699626858170  
0.0302547757373994 0.2047609624055251 0.1623548055276662  
0.8964683692157074 0.1168979009471155 0.1981253541585485  
0.2075788761553548 0.1196976272423579 0.0029879128451490  
0.0783189811000534 0.0973175508083062 0.8826974234586098  
0.1808381008259513 0.9591794724623763 0.9315208188157976

0.9626150661496775 0.1385707761603399 0.1231329383661741

H<sub>2</sub>, gas phase. Energy = -6.7512936 eV.

1.0000000000000000

10.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 10.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 10.0000000000000000

H

2

Direct

0.0000000000000000 -0.0000000000000000 0.0123884836905611

-0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0876115163094403

NH<sub>3</sub> gas phase. Energy = -19.508546 eV.

1.0000000000000000

10.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 10.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 10.0000000000000000

N H

1 3

Direct

0.4883502520223718 0.5032952424555392 0.4367978355214812

0.4987635874860679 0.5338712781402698 0.5339657805309801

0.5818340354584145 0.4762179777515619 0.4049837175052745

0.4627301250331450 0.5866155016526304 0.3830526664422580

H<sub>2</sub>O, gas phase. Energy = -14.217861 eV

1.0000000000000000

10.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 10.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 10.0000000000000000

O H

1 2

Direct

0.5051584472932689 0.5000000000000000 0.5035062376936636

0.5000099443300314 0.5000000000000000 0.6006589082720168

0.6005016083767032 0.5000000000000000 0.4841748540343147

MeOH, gas phase. Energy = -30.23242 eV.

2.7860000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

C O H  
1 1 4

Direct

0.4650203242543611 0.3817725430944279 0.4926387341547027  
0.3101363826907644 0.3397743641824036 0.4517662418973885  
0.4353047236948839 0.3887660798090522 0.5448307072490621  
0.4949127468965528 0.2688645426217704 0.4861785441608362  
0.5892292369127290 0.5125424689560774 0.4785977486774513  
0.2851240563002833 0.4413682347039654 0.4547087410009567

CH<sub>2</sub>O, gas phase. Energy = -22.155152 eV.

2.7860000000000000  
2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

C O H  
1 1 2

Direct

0.4274038306100607 0.3445948719191847 0.4940885566419340  
0.2917196374061248 0.3427004994047991 0.4718218017549205  
0.4812283317006703 0.3998738023032757 0.5439549021197081  
0.5054829271482006 0.2911491969535120 0.4659653469789831

EtOH, gas phase. Energy = -46.962748 eV.

2.7860000000000000  
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

C O H  
2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.1696755865201025 0.5790119646733219 0.4778208493039882 T T T  
0.1846757312760509 0.6288952588664757 0.5497982324585774 T T T  
0.3383903497279107 0.6900346039047400 0.4427421449452121 T T T  
0.3673207672269377 0.8181107194066083 0.4453507414468177 T T T  
0.1406669845386283 0.4361545972324998 0.4717712987161276 T T T  
0.0545056743037223 0.5369517458195540 0.5753828593290534 T T T  
0.2966392081626421 0.6167800667726014 0.5731146375132035 T T T  
0.2131383245380997 0.7716377680551870 0.5562674735672887 T T T  
0.0545556214330533 0.5879479319354041 0.4548699588291755 T T T

Ethanal, gas phase. Energy = -39.175511 eV.

```
2.786000000000000
 2.999999999999996 0.000000000000000 0.000000000000000
-1.499999999999998 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336
C O H
 2 1 4
```

Selective dynamics

Direct

```
0.4606339623383767 0.1780888902268903 0.5041034653662844 T T T
0.5011291296010959 0.2422838968082703 0.5736405157734150 T T T
0.3060318472249621 0.0916598273080596 0.4806823258308396 T T T
0.5851436392491276 0.2151148381059251 0.4731771792837745 T T T
0.5815596403351864 0.1858175328781352 0.5967677324685995 T T T
0.5903031676550620 0.3938276682000117 0.5746065046675700 T T T
0.3734045660420681 0.2003930222452832 0.6010309613884188 T T T
```

MeOH@Pd. Energy = -217.1836 eV.

```
2.786000000000000
 2.999999999999996 0.000000000000000 0.000000000000000
-1.499999999999998 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336
Pd C O H
 36 1 1 4
```

Selective dynamics

Direct

```
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F
```

0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2229267347381546	0.1119909784294361	0.2207547589321613	T	T	T
0.5555734639643832	0.1103542265642700	0.2199693150470407	T	T	T
0.8885093333677477	0.1102773382975353	0.2199144831445244	T	T	T
0.2227246816890064	0.4434108139193559	0.2205217782789259	T	T	T
0.5538901517313655	0.4429916500645735	0.2207714744476954	T	T	T
0.8888485440444320	0.4443113053884532	0.2195783846053085	T	T	T
0.5556870913392135	0.7774696958708583	0.2199452112902570	T	T	T
0.8889065925848895	0.7772689790094772	0.2197595813181702	T	T	T
0.2219737727959997	0.7773233192334918	0.2197048305386392	T	T	T
0.9985883544535065	0.9972933828572393	0.3297835677181920	T	T	T
0.3333335834070251	0.9972490665446274	0.3299143215290327	T	T	T
0.6665362816489879	0.9986172423610900	0.3302044685390025	T	T	T
0.3334555311351227	0.3308415862100005	0.3331502634528068	T	T	T
0.6680720036367874	0.3320623285924645	0.3297238035097507	T	T	T
0.9987807048571765	0.3323717813111115	0.3294165987017882	T	T	T
0.3332990607497606	0.6664773446247209	0.3297241542522624	T	T	T
0.6676966013350277	0.6666148971090951	0.3297288565030633	T	T	T
1.0000330053494040	0.6653237983980727	0.3302305605995411	T	T	T
0.4677834604873190	0.3831410030662191	0.4862102057926208	T	T	T
0.3096980383997856	0.3412677049918724	0.4457967300780552	T	T	T
0.4344541422603936	0.3901687092560498	0.5377950035366194	T	T	T
0.4954286307165376	0.2690971422998817	0.4793456061296456	T	T	T
0.5901471376166556	0.5134235015116189	0.4711585343689265	T	T	T
0.2859217646110742	0.4445782546030010	0.4477363898423060	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>OH@Pd. Energy = -216.60957 eV.

2.786000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F



0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2215422562680874	0.1090854795016473	0.2199380039320115	T	T	T
0.5568181808892027	0.1136907301993467	0.2222807583697972	T	T	T
0.8883890511039235	0.1091344863622189	0.2198212441052712	T	T	T
0.2225143460135293	0.4435266491455898	0.2195492909323137	T	T	T
0.5557911771157236	0.4425267253592288	0.2207190998525416	T	T	T
0.8892570706467161	0.4434148525243657	0.2207516717297509	T	T	T
0.5548905180341230	0.7770916949685882	0.2194157046400292	T	T	T
0.8886084464969142	0.7760092903243612	0.2201336825882055	T	T	T
0.2215713127989796	0.7766095559738878	0.2203130507467430	T	T	T
-0.0002495403075823	0.9967058027407371	0.3299814704485836	T	T	T
0.3308420089074208	0.9949115618664255	0.3305217686313892	T	T	T
0.6657340578174966	0.9944484921584117	0.3300324724494536	T	T	T
0.3309433827256646	0.3291197818756227	0.3297135321423597	T	T	T
0.6668014206466074	0.3279105162362858	0.3350347190411313	T	T	T
0.0020331062874256	0.3287648360149953	0.3296465372916054	T	T	T
0.3324276912078626	0.6626675019170809	0.3301916503619333	T	T	T
0.6648761283258519	0.6655985778469773	0.3290284936785713	T	T	T
0.0010690481368867	0.6637422394626941	0.3320213569553689	T	T	T
0.6952956157677066	0.3787179209787234	0.4447121626112454	T	T	T
0.5976403614282534	0.4615318115607809	0.4652816295698492	T	T	T
0.8230834778659799	0.4318579263006549	0.4730728017737644	T	T	T
0.4795194542699033	0.4065693481513651	0.4410824761233200	T	T	T
0.6193860970548727	0.2263411030690999	0.4438192872816902	T	T	T
0.8188721080193430	0.4893226052544566	0.3893383169880786	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>3</sub>O@Pd. Energy = -216.22753 eV.

2.786000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111001	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111001	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2243818691654195	0.1119784024435919	0.2204030755902202	T	T	T
0.5585821365265630	0.1125920745225824	0.2198135650521296	T	T	T
0.8916945809186365	0.1123016339431573	0.2201886159170756	T	T	T
0.2251285496969215	0.4453851766308320	0.2207817515051243	T	T	T
0.5553117631496893	0.4441978441933743	0.2222950499905102	T	T	T
0.8916395826900662	0.4455501775287696	0.2198109229050208	T	T	T
0.5584632640021072	0.7790793993803765	0.2199150859010636	T	T	T
0.8915101060066535	0.7787900641688074	0.2198035789746815	T	T	T
0.2248381833521348	0.7788698529560718	0.2195501983958470	T	T	T
0.0042709418468184	0.0030151042397771	0.3312233108431136	T	T	T
0.3396170727670938	0.0013038768752565	0.3293309123602629	T	T	T
0.6709043774423443	0.0017800667164694	0.3299379607349720	T	T	T
0.3491164239876051	0.3406180031766926	0.3332201487541436	T	T	T
0.6765831573834497	0.3369382091727123	0.3303453715214393	T	T	T
0.0048282841074376	0.3339611212296109	0.3314173013978994	T	T	T
0.3398708304849430	0.6705628445994679	0.3298150512712862	T	T	T
0.6764247153021664	0.6722582338238936	0.3303088525474082	T	T	T
0.0071724328955702	0.6694992357218873	0.3299045356739400	T	T	T
0.3029977966275004	0.4261776103525886	0.4711450025404382	T	T	T
0.2615418001696624	0.2759504715548391	0.4287325488471001	T	T	T
0.2290214398144470	0.3681657874891199	0.5175959460501868	T	T	T
0.4527858012133251	0.5070478837693337	0.4806869471059466	T	T	T
0.2573218268987973	0.5201914979661336	0.4511467508876802	T	T	T
0.0865512026000740	0.2173170868268985	0.3827413846655182	T	T	T

CH<sub>2</sub>OH@Pd. Energy = -213.35163 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2223170404715105	0.1112019483384162	0.2195578074680762	T	T	T
0.5555234252502217	0.1110709301504124	0.2199253650683305	T	T	T
0.8882537177357366	0.1110754133454580	0.2199230609414381	T	T	T
0.2219353792676731	0.4443714790043525	0.2197908217775433	T	T	T
0.5560284981238702	0.4459285843389456	0.2211618759977901	T	T	T
0.8885890279908456	0.4445823253704764	0.2198413542123092	T	T	T
0.5561965267867315	0.7770902520241419	0.2209860507264066	T	T	T
0.8867841259519181	0.7770271859537599	0.2211255608087053	T	T	T
0.2221042311070893	0.7780959841675339	0.2196795779611884	T	T	T
0.0009242711948831	0.0011527028545158	0.3295358827083675	T	T	T
0.3326229067265594	0.0002372683513917	0.3299317051506386	T	T	T
0.6657488193547008	-0.0002963680284543	0.3303765511388715	T	T	T
0.3325188824828578	0.3329812755847626	0.3299143607214001	T	T	T
0.6660217302161467	0.3335775928130508	0.3298946118466509	T	T	T
0.9991189003616231	0.3331618236015127	0.3297561367921432	T	T	T
0.3317155679546401	0.6664509725374758	0.3294699450466130	T	T	T
0.6656278344229082	0.6665664677388728	0.3371249134951247	T	T	T
0.9997568927494671	0.6669536089438927	0.3296049864279011	T	T	T
0.6728048083467677	0.6821920676231236	0.4371096331757569	T	T	T
0.6925541847301807	0.8482922281652727	0.4587263149807801	T	T	T
0.7908044269357783	0.6630676203109054	0.4488265932756793	T	T	T
0.8192677418613799	0.9472931208604287	0.4493005214680140	T	T	T
0.5389730461151023	0.5689800043327095	0.4536235470928648	T	T	T

CH<sub>3</sub>O@Pd. Energy = -213.04949 eV.

2.786000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.499999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.2226641671181077	0.1116997076211222	0.2193957020768635	T T T
0.5561517533443970	0.1113050509972699	0.2195563612978831	T T T
0.8887596548816631	0.1112736094852281	0.2195395821654551	T T T
0.2206307723610424	0.4435651604212971	0.2215057046092255	T T T
0.5564186686786506	0.4435837178144579	0.2215429237319674	T T T
0.8886692188314697	0.4438670701797877	0.2195481831831814	T T T
0.5564661784692727	0.7793729908268544	0.2215077104913259	T T T
0.8883258830653900	0.7773339255378386	0.2194010295054312	T T T
0.2226731094102794	0.7773272640554075	0.2193773623957403	T T T
0.0011741246821297	0.9989090193707159	0.3285894795820851	T T T
0.3315514247424823	0.9988238673735783	0.3285729736456551	T T T
0.6610263408869448	0.9880981756232747	0.3304897091344239	T T T
0.3336011514978996	0.3332497620800339	0.3308180576662742	T T T
0.6609892812637767	0.3389619900443780	0.3305691507177608	T T T
0.0119573868249738	0.3391218398288721	0.3304882478467608	T T T
0.3336476888462027	0.6664378909452392	0.3308425027566628	T T T
0.6668038884370119	0.6664422336571502	0.3308228983499101	T T T
0.0011827655549829	0.6684435402055883	0.3285871493983384	T T T
0.7791459263549709	0.2209996553744654	0.4652041224620124	T T T
0.7783266684456637	0.2217780944098547	0.3952258186387592	T T T
0.8471435347394610	0.3642506383327989	0.4831839863787216	T T T
0.8550668603567715	0.1530485998162856	0.4825404898459049	T T T

0.6359091862758952 0.1450685160941987 0.4831727775517157 T T T

CH<sub>2</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>O@Pd. Energy = -212.63188 eV.

2.786000000000000

3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000

-1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000

0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495283

Pd C O H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2193893407332110	0.1102933579818379	0.2198263249108571	T	T	T
0.5519937095687936	0.1087717230638382	0.2195134101624573	T	T	T
0.8847102732456307	0.1104833470071877	0.2199085900929850	T	T	T
0.2182953890220208	0.4431243867364624	0.2199193132344122	T	T	T
0.5528123359480782	0.4444282225552331	0.2203756268520841	T	T	T
0.8861088552880720	0.4448463208617532	0.2208238906402202	T	T	T
0.5529713608710700	0.7750815191613584	0.2212425399287382	T	T	T
0.8871664524178396	0.7772889687703822	0.2206707069626213	T	T	T
0.2169276674889285	0.7752956855110046	0.2210996861236458	T	T	T
0.9944372462959561	0.0032865899104110	0.3305467730218165	T	T	T
0.3258454674742803	0.9971946564242360	0.3297982323421945	T	T	T
0.6599760225376071	0.9980157978306844	0.3309064182202059	T	T	T
0.3267062769396925	0.3309478467647132	0.3296004416776377	T	T	T
0.6580916877065905	0.3263905436718805	0.3289648467410160	T	T	T
0.9934841634017171	0.3323978383772135	0.3302601638531570	T	T	T
0.3245434463666253	0.6641825129233262	0.3301621121438824	T	T	T
0.6597697314393554	0.6627293250816477	0.3326164716829046	T	T	T

0.9900730441340128 0.6621840448854143 0.3366223881281429 T T T  
0.9059895978814583 0.6681638404292523 0.4334858077303966 T T T  
0.7709148781900012 0.7094331437470821 0.4327561547038528 T T T  
0.0428096504963041 0.7797633379449693 0.4499400112330604 T T T  
0.8631501048634943 0.5280132911588552 0.4516341263796815 T T T  
0.8430170403910290 0.8842736696949545 0.3899220310124824 T T T

CH<sub>3</sub>O\_to\_CH<sub>2</sub>O@Pd. Energy = -212.48483 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Pd C O H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.33333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.66666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333332728696163 0.3333332124058899 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666062029449 0.3333332124058899 0.0000000000000000 F F F  
0.999999395362806 0.3333332124058899 0.0000000000000000 F F F  
0.3333332124058899 0.6666664248117868 0.0000000000000000 F F F  
0.6666665457392256 0.6666664248117868 0.0000000000000000 F F F  
0.9999998790725613 0.6666664248117868 0.0000000000000000 F F F  
0.1111113007303857 0.2222226014607713 0.1111113325119959 F F F  
0.4444446340637214 0.2222226014607713 0.1111113325119959 F F F  
0.7777779673970571 0.2222226014607713 0.1111113325119959 F F F  
0.4444445736000020 0.5555558138666683 0.1111113325119959 F F F  
0.7777779069333306 0.5555558138666683 0.1111113325119959 F F F  
0.1111112402666663 0.5555558138666683 0.1111113325119959 F F F  
0.4444445131362826 0.8888890262725582 0.1111113325119959 F F F  
0.7777778464696112 0.8888890262725582 0.1111113325119959 F F F  
0.1111111798029469 0.8888890262725582 0.1111113325119959 F F F  
0.2223199820440911 0.1114057206936394 0.2208271543465301 T T T  
0.5565854296537864 0.1130683531384662 0.2212846269394291 T T T  
0.8882746895232003 0.1101961242448226 0.2198259229232420 T T T  
0.2226651701416884 0.4415650405765064 0.2215250291175437 T T T  
0.5548009822524804 0.4439149650747183 0.2198843218072994 T T T  
0.8877524038372044 0.4429722682886208 0.2202146016765383 T T T  
0.5552083051531156 0.7772974067096570 0.2198919139811863 T T T  
0.8890991671218771 0.7772638730077759 0.2194402914346014 T T T  
0.2216471563138356 0.7761734154402191 0.2191512359301981 T T T  
0.9967824263651082 0.9965886759964349 0.3295264601055905 T T T  
0.3277408935111552 0.9919224492550853 0.3289548480843507 T T T  
0.6643679578706454 0.9965478301395478 0.3297954805178449 T T T

0.3279193224784649	0.3287807060875565	0.3337595742037749	T	T	T
0.6621215834044989	0.3292079299620312	0.3327291348868044	T	T	T
0.9962730664660100	0.3306524206952020	0.3300425510015614	T	T	T
0.3302321918503353	0.6645143804645741	0.3296570449227048	T	T	T
0.6658519247177992	0.6670477907801455	0.3293846037723469	T	T	T
0.9987852526443746	0.6643681165833044	0.3300491847141558	T	T	T
0.5662397107440427	0.3716432422947236	0.4401002307721882	T	T	T
0.3993378487019115	0.3487432738117278	0.4304257675130074	T	T	T
0.5787118969936813	0.2460107998474399	0.4454030369617286	T	T	T
0.6950022350949965	0.4918127179152805	0.3921988152898024	T	T	T
0.6512376350262485	0.4790938090591652	0.4755373050307504	T	T	T

CH<sub>2</sub>O@Pd, Energy= -209.37533 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495283

Pd C O H

36 1 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.999999938488742	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.999999876977554	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.111111119389534	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.444444477558136	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.777777314186096	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.444444477558136	0.888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.111111119389534	0.888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.2182737992747668	0.1081924054874399	0.2193039666638998	T	T	T
0.5537057691601736	0.1119931198413831	0.2218365708243487	T	T	T
0.8848965860393533	0.1089398650900584	0.2195258809377153	T	T	T
0.2182870984763385	0.4430475748774391	0.2193005369700722	T	T	T
0.5521291424744339	0.4425595634153430	0.2196972860147999	T	T	T
0.8852982928801463	0.4430946085020307	0.2203275462368361	T	T	T
0.5537653939521564	0.7747005681360153	0.2218339498405928	T	T	T

0.8853284646575342	0.7750913242282235	0.2203161266280745	T	T	T
0.2185064556199488	0.7757180443854723	0.2201878585070784	T	T	T
0.9900222318449891	0.9952748758845616	0.3289781378845574	T	T	T
0.3221071142051459	0.9928615604708713	0.3304216964669705	T	T	T
0.6574212123099843	0.9950422673399631	0.3306336339376250	T	T	T
0.3194245924578829	0.3259816629459859	0.3279503269394121	T	T	T
0.6514761404402303	0.3218365872285625	0.3318886456554532	T	T	T
0.9900647936917539	0.3273521505372082	0.3289986837337732	T	T	T
0.3221823712539411	0.6617111015895625	0.3304419209435702	T	T	T
0.6515728234706396	0.6622895046014455	0.3319179645162995	T	T	T
0.9966503616934260	0.6646098190624943	0.3328060217733659	T	T	T
0.8802424779676706	0.6060477384924744	0.4251383565913151	T	T	T
0.6976480513047633	0.5149218209191637	0.4124237985680139	T	T	T
0.9329040483126720	0.7442384171982291	0.4469055745093091	T	T	T
0.9326981776693057	0.5201267730643554	0.4467280438967658	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH@Pd, Energy = -214.9502 eV

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2228460699795679	0.1127032351889492	0.2192586972547597	T	T	T
0.5542176064622368	0.1102409086944065	0.2189241973675992	T	T	T
0.8880657480583781	0.1121590887544034	0.2191673198689855	T	T	T



0.2212763618280522	0.4452777741051572	0.2198047075505897	T	T	T
0.5555619915562368	0.4466337499347162	0.2206845468190094	T	T	T
0.8891168169453058	0.4466221297029631	0.2202378717493971	T	T	T
0.5558900556917236	0.7757678767839219	0.2215685035895242	T	T	T
0.8879990281791105	0.7778401536911332	0.2208395748240775	T	T	T
0.2194349140146901	0.7770180081623660	0.2209955077124731	T	T	T
0.0010397496984547	0.0041634330657622	0.3281213020849855	T	T	T
0.3323091682640993	0.0008815629190706	0.3296929961060263	T	T	T
0.6647660756216301	0.0015114817235718	0.3291408534595239	T	T	T
0.3313592549449346	0.3333612458716962	0.3294333833521322	T	T	T
0.6632034911294661	0.3296719346197504	0.3279614860467874	T	T	T
0.9984468507721613	0.3340495740560891	0.3292585658909972	T	T	T
0.3302397805836447	0.6676439380991899	0.3302997110362024	T	T	T
0.6638823152690859	0.6674569115817560	0.3352476710091129	T	T	T
1.0003388801793649	0.6682961828563968	0.3352706800565213	T	T	T
0.8988621588296246	0.6480978447339277	0.4333641831046799	T	T	T
0.7730750162423069	0.7048800595450412	0.4268175463109252	T	T	T
0.8416101492395426	0.4977808216825432	0.4370701227914434	T	T	T
0.8284547431694519	0.8419190418721572	0.4392867322423742	T	T	T
0.0244184517949002	0.7346422975832350	0.4620071825214742	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Pd, Energy = -218.14718 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F

0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2242883353132923	0.1135248448661586	0.2200476989567209	T	T	T
0.5598502562123034	0.1158201019136270	0.2206307224683903	T	T	T
0.8927313956054455	0.1137419203278756	0.2209369329042445	T	T	T
0.2254464731689730	0.4457610445599154	0.2210040111423830	T	T	T
0.5600554267909400	0.4487244466543908	0.2201807424255872	T	T	T
0.8879771772699835	0.4456197532958008	0.2216819134270643	T	T	T
0.5581399409954787	0.7815527565754645	0.2196871612385558	T	T	T
0.8931024739405395	0.7829010998810169	0.2205822781226843	T	T	T
0.2233340934635404	0.7782453803238447	0.2189698398773905	T	T	T
0.0127129588806969	0.0108674415651423	0.3353768963754512	T	T	T
0.3361506091322768	0.9978689713465916	0.3275372401246016	T	T	T
0.6729966124708688	0.0064505078331155	0.3298673159074171	T	T	T
0.3399273485750589	0.3430713826185527	0.3308292841562924	T	T	T
0.6656138630798378	0.3400478098388225	0.3381256398382477	T	T	T
0.0011515770517172	0.3400047456251822	0.3303650955976629	T	T	T
0.3378203568255155	0.6729188757286902	0.3296237589577343	T	T	T
0.6747131656839767	0.6775476720187945	0.3293846562464092	T	T	T
0.0033914924626224	0.6717594630586879	0.3303658102217479	T	T	T
0.5402818142785819	0.2944119872751699	0.4320683067771393	T	T	T
0.3745473089198766	0.2937834979323273	0.4298776288737195	T	T	T
0.5254450751338579	0.1566479337350723	0.4382796041487609	T	T	T
0.3792434199714793	0.4092292086633765	0.4494615890165052	T	T	T
0.6501225623112250	0.4053279462975754	0.4613253063316514	T	T	T
0.2069429790301859	0.1461398362765768	0.3895299867210773	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH\_to\_CH<sub>3</sub>NH@Pd. Energy = -218.15335 eV.

2.786000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F

0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2209257148644696	0.1123156616570699	0.2201442796169761	T	T	T
0.5536247405308773	0.1137319469199593	0.2198475472085989	T	T	T
0.8888327802792532	0.1130398152798722	0.2194415735204324	T	T	T
0.2221656918759413	0.4452191865661759	0.2210871959652493	T	T	T
0.5553034969816455	0.4463730879708312	0.2199971127643230	T	T	T
0.8866241697306250	0.4453782484867392	0.2206086051793029	T	T	T
0.5543462043840081	0.7798609519909512	0.2197846140378984	T	T	T
0.8853107647748306	0.7769457061026294	0.2222575362061432	T	T	T
0.2224950815560088	0.7758026677871339	0.2229540658066311	T	T	T
0.9989886771692921	0.0053130101408548	0.3304358284674650	T	T	T
0.3311848421615142	0.0030823812130138	0.3307480881917668	T	T	T
0.6694642521666083	0.0129654758342096	0.3282436599459178	T	T	T
0.3291475806821352	0.3289317263010791	0.3311768895459166	T	T	T
0.6669003161218217	0.3406146425921845	0.3324110180136247	T	T	T
0.9985293667000760	0.3395276157679181	0.3295130040040501	T	T	T
0.3342412579378098	0.6781321244871258	0.3345986054846680	T	T	T
0.6709364629601909	0.6811940595575372	0.3322254480427185	T	T	T
0.9996637450958485	0.6724475975856994	0.3315705965686274	T	T	T
0.4089639956074250	0.4508199933476634	0.4301470183215574	T	T	T
0.4827340796443483	0.6353096380928545	0.4067316936574426	T	T	T
0.5494247532770655	0.7362299931312162	0.4412760200098761	T	T	T
0.2615695020800419	0.3794233807180492	0.4434441348983214	T	T	T
0.4916131492593978	0.4380879333492719	0.4695361424593338	T	T	T
0.4752476811984344	0.3406105499385593	0.3905999719247319	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Pd, Energy = -219.33652 eV.

2.786000000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F

0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224976568234230	0.1128227556817062	0.2204041398225958	T	T	T
0.5559362113831671	0.1132303838576242	0.2208884893697852	T	T	T
0.8881539233347239	0.1118655963047491	0.2198516732009910	T	T	T
0.2226993642325631	0.4426229423598425	0.2216548146403176	T	T	T
0.5555452694047811	0.4445731505167256	0.2203793136303057	T	T	T
0.8859566119184210	0.4430619747194919	0.2214703763213292	T	T	T
0.5544518247671757	0.7787217370672760	0.2194772154410176	T	T	T
0.8893232175535294	0.7787423310197831	0.2191879913632397	T	T	T
0.2208813618014086	0.7766035866616441	0.2190976723332674	T	T	T
0.9983289175362298	0.0002975876513351	0.3291135102827627	T	T	T
0.3295775239030959	0.9949977025010659	0.3283783584144209	T	T	T
0.6653717540476356	0.0006848990596079	0.3296249701995508	T	T	T
0.3334994845270979	0.3346797077941415	0.3337999585560312	T	T	T
0.6609095482159904	0.3335796804091022	0.3364602150247084	T	T	T
0.9968623271327528	0.3335870680204298	0.3306246121126655	T	T	T
0.3311843918794498	0.6674645686706683	0.3299039684219774	T	T	T
0.6676075428522217	0.6710983910685870	0.3280439916510733	T	T	T
0.9980635451944643	0.6665351663659895	0.3298203205531127	T	T	T
0.5827334944400230	0.3329477159420636	0.4315002279797173	T	T	T
0.4091219444353805	0.3314746147861222	0.4334418592813391	T	T	T
0.5706524334539399	0.2062918134474587	0.4521176173648379	T	T	T
0.4162103991255301	0.4472395548114642	0.4532192011030111	T	T	T
0.6959266806055698	0.4603182761584930	0.4522510726690888	T	T	T
0.3008968166860724	0.2133839591830678	0.4521645318238251	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH@Pd. Energy = -218.93286 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 1 1 4

## Selective dynamics

### Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2236186041012131	0.1144444422635723	0.2233188409924610	T	T	T
0.5554701918804889	0.1085439072245089	0.2193392209338328	T	T	T
0.8898703424195479	0.1098899312088368	0.2201349005902478	T	T	T
0.2230270014908403	0.4429865677262275	0.2198850603150949	T	T	T
0.5561907761183745	0.4435404504309097	0.2202586768234498	T	T	T
0.8912313377103911	0.4443134392811807	0.2193424361412362	T	T	T
0.5567944924861845	0.776660947095805	0.2198743319292883	T	T	T
0.8853787356791282	0.7761362049233744	0.2233026821805616	T	T	T
0.2206878725229715	0.7791407555737959	0.2185208906635809	T	T	T
0.0023402467458714	0.9972398754610875	0.3320352692582597	T	T	T
0.3355421061568392	0.9956754523276143	0.3305636689089715	T	T	T
0.6695260309243398	0.9965149078697685	0.3298413786474136	T	T	T
0.3372237354415326	0.3277669753156709	0.3347551103171824	T	T	T
0.6727690545275671	0.3267719867962348	0.3277693210606231	T	T	T
0.0029036309942815	0.3299184505224066	0.3298602218680610	T	T	T
0.3310764533755505	0.6685818286675317	0.3261256170350865	T	T	T
0.6719895606421508	0.6623990077352656	0.3347153176285760	T	T	T
0.0039613561877787	0.6640763374203275	0.3305781303549785	T	T	T
0.5596514081505846	0.4405125790232051	0.4625371934948721	T	T	T
0.4938358841035755	0.5060554575960320	0.4079962782702178	T	T	T
0.4279190288342458	0.5724428347682559	0.4262714132570034	T	T	T
0.4422797645761579	0.3444803338035985	0.4932911158314451	T	T	T
0.6580791903093881	0.5583307459613163	0.4926163741050782	T	T	T
0.6298399347977784	0.3677383810664660	0.4439605723588576	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Pd. Energy = -222.40413 eV.

2.78600000000000  
3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000  
-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000  
0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 1 1 5

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2193416918045613	0.1089172091806722	0.2206588166802076	T	T	T
0.5544977514405857	0.1113893445064985	0.2217919510231542	T	T	T
0.8854800917126440	0.1079674223897393	0.2201116544979144	T	T	T
0.2195901946294533	0.4397874086252866	0.2215324894245846	T	T	T
0.5521075071083564	0.4415636230814859	0.2203071761227602	T	T	T
0.8846592197033339	0.4407103290720269	0.2210231860774442	T	T	T
0.5525518723870209	0.7749183269131297	0.2201783880611555	T	T	T
0.8865164411153441	0.7748977248800131	0.2197538263161103	T	T	T
0.2188950439101731	0.7738785941263338	0.2192458418287542	T	T	T
0.9927244481961541	0.9933991999650663	0.3299175944526225	T	T	T
0.3230567311981510	0.9875267604800506	0.3289622996293967	T	T	T
0.6604203779742630	0.9927363207038200	0.3303685607291915	T	T	T
0.3229465709339220	0.3261572248032785	0.3332884445865986	T	T	T
0.6558360693862281	0.3238894254225844	0.3349193743517216	T	T	T
0.9923348278152527	0.3272175349551926	0.3305707381974094	T	T	T
0.3263592629123003	0.6614514830448933	0.3304428863215266	T	T	T
0.6621475974856327	0.6641847624570885	0.3303850221984685	T	T	T
0.9949551822573358	0.6613115336328727	0.3305977782705219	T	T	T
0.5795095549697186	0.3539093860753739	0.4378204794649687	T	T	T
0.3949489383227897	0.3284713537763165	0.4352375502246978	T	T	T

0.5769547715482365 0.2227405672338715 0.4457568024854372 T T T  
0.6683823182071046 0.4564287434309838 0.4741203520056011 T T T  
0.3838737395774449 0.4331404259261636 0.4565761172496691 T T T  
0.2953018193968313 0.2024728814635146 0.4523046273075659 T T T  
0.6892074181342358 0.4969797492808869 0.3875866987384796 T T T

CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Pd. Energy = -221.79379 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 1 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F  
0.2209867330704974 0.1134156646261757 0.2202917051685000 T T T  
0.5532275887339679 0.1128943716827388 0.2206096440647652 T T T  
0.8867562127639982 0.1136977401313036 0.2193952467025238 T T T  
0.2223109170309628 0.4470134217290269 0.2208745887990277 T T T  
0.5537301745716793 0.4465650093243854 0.2197788286915201 T T T  
0.8898554373736168 0.4477347642314822 0.2190794097626814 T T T  
0.5542986588275615 0.7798923950243214 0.2200462431296926 T T T  
0.8871391003711241 0.7783201214957576 0.2195117290549972 T T T  
0.2235996320546519 0.7840319555832135 0.2229044995741752 T T T  
0.9901803901698758 0.0001433722944976 0.3278859479109160 T T T  
0.3222109863388978 0.9939800411232284 0.3346403265022626 T T T  
0.6620509523631868 0.0024468627957439 0.3297464996945908 T T T  
0.3267316212114051 0.3387502499024348 0.3324398847184212 T T T

0.6679525017679609	0.3407891063188295	0.3291213776381040	T	T	T
0.9942031297437477	0.3349917020232110	0.3302874480274654	T	T	T
0.3284885871678115	0.6677694878773885	0.3309726330747684	T	T	T
0.6626026092898878	0.6708847943795816	0.3302065804993856	T	T	T
0.9930595328975738	0.6661620973548252	0.3307225031046236	T	T	T
0.4679182404065564	0.1442872961212227	0.4733946139755873	T	T	T
0.3499088429979896	0.1345168543986410	0.4190326037288343	T	T	T
0.6049009242168675	0.1789429530852369	0.4547343277254628	T	T	T
0.4076877220630649	0.0109518362184273	0.4992129551343049	T	T	T
0.4920943428235761	0.3258981864852005	0.3811642478594541	T	T	T
0.2250535625129082	0.1147424697519484	0.4351687879332018	T	T	T
0.4847994740805956	0.2522831835028803	0.5082903086588696	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Pd. Energy = -223.27015 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 1 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.2222222222222214	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.2222222222222214	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.2222222222222214	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.2222222222222214	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.2222222222222214	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.2222222222222214	F	F	F



0.555555555555571	0.777777777777786	0.222222222222214	F	F	F
0.888888888888857	0.777777777777786	0.222222222222214	F	F	F
0.222222222222214	0.777777777777786	0.222222222222214	F	F	F
0.9992871307672495	0.9985302283550143	0.3317908398044713	T	T	T
0.3334551923814681	0.9985726088690204	0.3319448596714145	T	T	T
0.6674059037986242	0.0001626090981406	0.3323625836286250	T	T	T
0.3352174765504948	0.3338648739737283	0.3357965225888569	T	T	T
0.6689157513781893	0.3336601422537996	0.3316665327368354	T	T	T
0.9992076656230663	0.3338725077705040	0.3316276169020586	T	T	T
0.3335532469042353	0.6682484865618722	0.3318250530092186	T	T	T
0.6688153928239535	0.6682396212056697	0.3318629408202700	T	T	T
0.0006137304374654	0.6669589888841269	0.3327884525907407	T	T	T
0.4691130374609060	0.3566231450979391	0.4799330924252648	T	T	T
0.3120911277484348	0.3317460300581770	0.4394160400187154	T	T	T
0.4991034140766878	0.2459413914238934	0.4686517430875852	T	T	T
0.4375249487149634	0.3535407952322083	0.5323709773874586	T	T	T
0.2805502873650756	0.4335754937370416	0.4484475463525887	T	T	T
0.1957000554608879	0.2076286469748981	0.4490382540883483	T	T	T
0.5912336777307809	0.4893657699223812	0.4676021240855038	T	T	T

MeOH@Ni. Energy = -224.80846.

2.48430000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F

0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2234889042342158	0.1138667453956331	0.2222460808960152	T	T	T
0.5551322736620271	0.1106595918604791	0.2201126988366549	T	T	T
0.8887048377404213	0.1107006020390142	0.2201406696600038	T	T	T
0.2231124799062120	0.4432711531319535	0.2218270819116025	T	T	T
0.5526397779448261	0.4427989810576182	0.2220422829102086	T	T	T
0.8886630477495054	0.4445981213291369	0.2198493728787313	T	T	T
0.5553267827690295	0.7773572339844969	0.2200352180298505	T	T	T
0.8889804446248987	0.7776908791595594	0.2199907713290818	T	T	T
0.2216983945432247	0.7776898253070887	0.2198950837707163	T	T	T
0.9977044523792640	0.9978808604635263	0.3291069360632001	T	T	T
0.3337398448543319	0.9975273303226228	0.3290159546520273	T	T	T
0.6662208836380868	0.9990508659945798	0.3295656146306327	T	T	T
0.3342162156987915	0.3327912136432463	0.3374550894767496	T	T	T
0.6685031955733494	0.3320361759130456	0.3286956988545363	T	T	T
0.9970950365704300	0.3326184668019880	0.3284645983035425	T	T	T
0.3335539505519265	0.6688521211831840	0.3286237151430129	T	T	T
0.6685253654160764	0.6687682953314278	0.3287298238668192	T	T	T
0.9999559438193928	0.6658671838347584	0.3291878662551769	T	T	T
0.4836986807100984	0.3851831508742540	0.5023012408673275	T	T	T
0.3123677626668631	0.3393922240033189	0.4536285004220147	T	T	T
0.4358930599221907	0.3850081915997983	0.5593464937510374	T	T	T
0.5199674047893681	0.2609465275333724	0.4943254126565902	T	T	T
0.6208577995259709	0.5349431194281099	0.4885760293377973	T	T	T
0.2740563358485945	0.4468460662549116	0.4588920713056719	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>OH@Ni. Energy = -224.01482 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F

0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2206641073330863	0.1112060267799020	0.2200524519006452	T	T	T
0.5557313549068422	0.1088322934694635	0.2218440102554676	T	T	T
0.8868537138152456	0.1106611119234110	0.2206731773771950	T	T	T
0.2208585989580604	0.4439961776573417	0.2201047774723049	T	T	T
0.5539965083222598	0.4441312429827051	0.2199802783990785	T	T	T
0.8872077737811018	0.4437684780127575	0.2203903600957032	T	T	T
0.5558917379425691	0.7810325507473499	0.2218797212194995	T	T	T
0.8876376840706740	0.7782643309907359	0.2203822942586067	T	T	T
0.2209305944788652	0.7772836314650056	0.2199384718965036	T	T	T
0.9986512410433483	0.0000454753811116	0.3300178677633439	T	T	T
0.3272626373575970	0.9982226830743092	0.3282057366082877	T	T	T
0.6643280610288957	-0.0004755438235866	0.3388897041746260	T	T	T
0.3318062345019073	0.3330317488413638	0.3292748640985759	T	T	T
0.6630211045269502	0.3352773548082366	0.3287372976899981	T	T	T
0.9994503029747257	0.3343836468191960	0.3297298695121681	T	T	T
0.3279955861255194	0.6646409407637941	0.3284355727649824	T	T	T
0.6630728760950341	0.6625583141340833	0.3285705192536013	T	T	T
0.9981245728491220	0.6670668326734325	0.3292657258450377	T	T	T
0.6846721949965793	0.0222441805223403	0.4556303561709036	T	T	T
0.6243235625832065	0.1598034611945731	0.4793776127962881	T	T	T
0.8140539983765643	0.0404591822379891	0.4895592659252050	T	T	T
0.4997653881471421	0.1338467737916961	0.4515496727060221	T	T	T
0.5617229754732219	0.8581161444772996	0.4529868600687394	T	T	T
0.8528228255863205	0.1114468055256739	0.3938698692016417	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>3</sub>O@Ni. Energy= -223.92649 eV.

2.484300000000000		
3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H  
36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333332556249786	0.3333331779166286	0.000000000000000	F	F	F
0.6666665889583143	0.3333331779166286	0.000000000000000	F	F	F

0.9999999222916500	0.3333331779166286	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333331779166286	0.666663558332644	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666665112499643	0.666663558332644	0.0000000000000000	F	F	F
0.999998445833000	0.666663558332644	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111110593055429	0.2222221186110858	0.1111110320568613	F	F	F
0.4444443926388786	0.2222221186110858	0.1111110320568613	F	F	F
0.777777259722072	0.2222221186110858	0.1111110320568613	F	F	F
0.4444452771809750	0.5555572210286144	0.1111110320568613	F	F	F
0.7777786105143107	0.5555572210286144	0.1111110320568613	F	F	F
0.1111119438476393	0.5555572210286144	0.1111110320568613	F	F	F
0.4444442372221715	0.8888884744443502	0.1111110320568613	F	F	F
0.7777775705555072	0.8888884744443502	0.1111110320568613	F	F	F
0.1111109038888429	0.8888884744443502	0.1111110320568613	F	F	F
0.2227496960869465	0.1128084358831435	0.2214969086975841	T	T	T
0.5554769623873903	0.1115080449985312	0.2200978253716179	T	T	T
0.8891861497864404	0.1113473989077639	0.2200392701261996	T	T	T
0.2232341019208359	0.4431820102693582	0.2216029101281851	T	T	T
0.5527900836668194	0.4429218540084134	0.2221370618018142	T	T	T
0.8889097768522862	0.4444391159075696	0.2199474988829457	T	T	T
0.5555896608690580	0.7776293451139091	0.2200165921833079	T	T	T
0.8890652480582553	0.7776094318425161	0.2198903744623239	T	T	T
0.2219267012252450	0.7776944224500223	0.2198798213409321	T	T	T
0.9961667695726959	0.9993022557848494	0.3299112454326698	T	T	T
0.3344852271179349	0.9974107873706044	0.3286143061103654	T	T	T
0.6657881672228915	0.9999041207551326	0.3294091100107054	T	T	T
0.3391703929394687	0.3374214879841110	0.3371017725060138	T	T	T
0.6705605237797045	0.3342665204864746	0.3289949693981834	T	T	T
0.9981100582541833	0.3306466143185095	0.3302908456472540	T	T	T
0.3345429436951866	0.6702449842918443	0.3285748907223732	T	T	T
0.6697554168146651	0.6697537611216223	0.3286841317398918	T	T	T
0.0006372093171710	0.6667850132932855	0.3286970048391316	T	T	T
0.3140976980559718	0.4323910794838220	0.4920835903619248	T	T	T
0.2820096264614050	0.2759764618493590	0.4403550784881699	T	T	T
0.2745284852810410	0.3605059768847317	0.5469256647144083	T	T	T
0.4771025549504929	0.5585524504805771	0.4919631753269125	T	T	T
0.2150552878111335	0.5007049750327602	0.4804873106211954	T	T	T
0.0955068437431399	0.2157629810302548	0.3907861521048757	T	T	T

CH<sub>2</sub>OH@Ni. Energy = -220.69606 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2230020393870220	0.1117462933963105	0.2197154493583795	T	T	T
0.5573973040500052	0.1101949974482336	0.2222963409008386	T	T	T
0.8865703342411974	0.1097758535251880	0.2209630657891912	T	T	T
0.2220370606349569	0.4440051066864762	0.2197787665343213	T	T	T
0.5569115393751927	0.4471465089352090	0.2211810117593756	T	T	T
0.8883158533015523	0.4445527396333931	0.2199274475833637	T	T	T
0.5564523232598330	0.7784705468088932	0.2216336947407491	T	T	T
0.8856758043954887	0.7764435874028690	0.2209578198998531	T	T	T
0.2218363529284090	0.7783205356448527	0.2200745322973612	T	T	T
0.0049825400077394	0.0020660319252206	0.3274645601915219	T	T	T
0.3313287301374568	0.0005796771081506	0.3290600218787360	T	T	T
0.6658735164355418	0.0011212116615248	0.3354717729922567	T	T	T
0.3329435081508861	0.3334123636360249	0.3286938761341316	T	T	T
0.6669710909608760	0.3367135966516224	0.3293052990353884	T	T	T
0.0005056552421558	0.3353813920140074	0.3283409062516778	T	T	T
0.3279312695570976	0.6646177919396236	0.3279336817874288	T	T	T
0.6651638187634827	0.6695293773541986	0.3377753157389883	T	T	T
0.9987295546501802	0.6667165526088171	0.3289983446933587	T	T	T
0.6526500083125896	0.7357833064828214	0.4395128439808734	T	T	T
0.6867966796549626	0.9450668176815510	0.4477058616416345	T	T	T
0.7717596672826503	0.7197041620014861	0.4695133589171405	T	T	T
0.8362493697820330	0.0402430894389235	0.4539765623447351	T	T	T
0.4976192456665035	0.6320287201862117	0.4617840789005335	T	T	T

CH<sub>3</sub>O@Ni. Energy = -221.34082 eV.

2.48430000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.499999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H  
36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.2226228761929752	0.1118348077528207	0.2198902772136790	T T T
0.5568756770664616	0.1117296302203102	0.2206667870177943	T T T
0.8882528733837685	0.1117983491873259	0.2206596616600092	T T T
0.2191584935050737	0.4428013129013237	0.2218557325240900	T T T
0.5572032157716690	0.4428162175766047	0.2218917924896669	T T T
0.8882581047873884	0.4431249851707145	0.2206662207036666	T T T
0.5572507760806574	0.7808648598647432	0.2218529359895783	T T T
0.8882229614636126	0.7774178537335625	0.2198811866265096	T T T
0.2226947983719136	0.7773549876897315	0.2199258536001150	T T T
0.0024734867415450	0.9975471509049252	0.3281675897362323	T T T
0.3285757348587695	0.9974465941295838	0.3281617926093015	T T T
0.6629055270786559	0.9920010693394870	0.3331403910810312	T T T
0.3335706254624284	0.3331936916789915	0.3294954715620115	T T T
0.6627785777469291	0.3371248852766252	0.3333016198780864	T T T
0.0079905681520646	0.3372553090846921	0.3331495385399112	T T T
0.3337175753264495	0.6664589618427206	0.3294703009091249	T T T
0.6669513698728263	0.6664510557066035	0.3294922706109040	T T T
0.0026190109997329	0.6714331186578544	0.3281623753789529	T T T
0.7790542215428684	0.2209446816326520	0.4825462462929466	T T T
0.7781026889557756	0.2219012923279386	0.4038044100790140	T T T
0.8559775724161609	0.3816242301778549	0.5025567505994566	T T T
0.8635165201821920	0.1440313121234346	0.5018238058624875	T T T

0.6183718931169601 0.1364786558560132 0.5025328642204757 T T T

CH<sub>2</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>O@Ni. Energy = -220.04186 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Ni C O H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2228144723741536	0.1098821949058149	0.2196205490525074	T	T	T
0.5550752414962190	0.1090913502974757	0.2200633394476839	T	T	T
0.8875972817578912	0.1099951648590363	0.2199601068097721	T	T	T
0.2216881405095563	0.4431905003590089	0.2199987511247556	T	T	T
0.5569905652542388	0.4453888427639043	0.2213018803715059	T	T	T
0.8891475352768907	0.4454072897933372	0.2208533525073761	T	T	T
0.5559404385869868	0.7752961844190622	0.2217156204178465	T	T	T
0.8890757603132542	0.7761821457214211	0.2207950536195611	T	T	T
0.2195249813264937	0.7752147115176982	0.2208357975654067	T	T	T
0.0012030985713238	0.0052851309769792	0.3281119822646588	T	T	T
0.3318794452207996	0.9960836153877821	0.3282960987538885	T	T	T
0.6685590018907703	0.9981388852731357	0.3308966304848582	T	T	T
0.3301491983120997	0.3287182857514850	0.3284770135131723	T	T	T
0.6637959503471009	0.3248813925383587	0.3281898853617449	T	T	T
0.9993518767094756	0.3324187636375839	0.3293182106419010	T	T	T
0.3281496695714523	0.6631543527203121	0.3287816177607112	T	T	T
0.6628015766083450	0.6603927700668990	0.3342705242868220	T	T	T

0.9949404850703374	0.6627931836201100	0.3366962037433723	T	T	T
0.9038740863310366	0.6700893651103286	0.4382251887845143	T	T	T
0.7448596618641119	0.7140491806109139	0.4394050619847079	T	T	T
0.0510691556437379	0.7940059875881360	0.4612117775866267	T	T	T
0.8538366978384460	0.5158592435022342	0.4617532537761946	T	T	T
0.7954163541948631	0.8868065163561453	0.3940789881541892	T	T	T

CH<sub>3</sub>O\_to\_CH<sub>2</sub>O@Ni. Energy = -220.4351 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Ni C O H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333332728696163	0.3333332124058899	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666062029449	0.3333332124058899	0.0000000000000000	F	F	F
0.999999395362806	0.3333332124058899	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333332124058899	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666665457392256	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.999998790725613	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111113007303857	0.2222226014607713	0.1111113325119959	F	F	F
0.4444446340637214	0.2222226014607713	0.1111113325119959	F	F	F
0.7777779673970571	0.2222226014607713	0.1111113325119959	F	F	F
0.4444445736000020	0.5555558138666683	0.1111113325119959	F	F	F
0.7777779069333306	0.5555558138666683	0.1111113325119959	F	F	F
0.1111112402666663	0.5555558138666683	0.1111113325119959	F	F	F
0.4444445131362826	0.8888890262725582	0.1111113325119959	F	F	F
0.7777778464696112	0.8888890262725582	0.1111113325119959	F	F	F
0.1111111798029469	0.8888890262725582	0.1111113325119959	F	F	F
0.2241351686736633	0.1155939197755728	0.2217895750063916	T	T	T
0.5570568030816405	0.1147069553904716	0.2209433439198796	T	T	T
0.8898484858200361	0.1127297311224277	0.2200316081452001	T	T	T
0.2240006721628630	0.4443413648193231	0.2212609175348493	T	T	T
0.5572744943317901	0.4455688859047928	0.2211450139275336	T	T	T
0.8900044352198406	0.4458634136021814	0.2198516844091270	T	T	T
0.5567139952695330	0.7787890739870972	0.2202490316917908	T	T	T
0.8867037486061360	0.7782321031687074	0.2216742015004682	T	T	T
0.2223429232568346	0.7788650924401364	0.2191907508019361	T	T	T
0.0025408607595646	0.0034644593432348	0.3293000276797483	T	T	T
0.3308197214770648	0.9966197444963536	0.3280523808788349	T	T	T
0.6680958519330346	0.9992257350282974	0.3282371677783633	T	T	T



0.3363456222425960	0.3342085571024832	0.3351546781304815	T	T	T
0.6735756744636857	0.3290401262640529	0.3333982271096718	T	T	T
0.0029766145291317	0.3348027607591998	0.3296965290787279	T	T	T
0.3320488078434808	0.6719485286032786	0.3275732382227812	T	T	T
0.6668399344141374	0.6723719403299542	0.3330101582086693	T	T	T
0.0046633218010449	0.6699878167269755	0.3286945528509635	T	T	T
0.6447266744009544	0.4035515737457965	0.4424039865734465	T	T	T
0.5259029573924362	0.4861264620903876	0.4179376668034369	T	T	T
0.5548197161861714	0.2445875660978953	0.4637661179710997	T	T	T
0.8281079948115223	0.4282532397056063	0.3981119643826501	T	T	T
0.7643133985961615	0.5081421949268999	0.4814254520352463	T	T	T

CH<sub>2</sub>O@Ni. Energy = -217.12427 eV.

2.484300000000000

2.9999999999999996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.4999999999999998	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H

36 1 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2212834377986056	0.1098814650685232	0.2197203018199615	T	T	T
0.5570140017183430	0.1145998069449466	0.2220822734657338	T	T	T
0.8874350681317104	0.1103747795776899	0.2199731725152999	T	T	T
0.2212783298324232	0.4446867425820648	0.2197088318122398	T	T	T
0.5555309603980858	0.4443902672601303	0.2209497676083464	T	T	T
0.8875378472149378	0.4452526424584005	0.2209008161266487	T	T	T
0.5570604165999956	0.7756720214852948	0.2220874143242523	T	T	T

0.8875614782463720	0.7755767803704534	0.2209115354693398	T	T	T
0.2216206894842240	0.7774770450564613	0.2198344795206958	T	T	T
0.9968055220552667	0.0002618058164589	0.3281056737728375	T	T	T
0.3290000634557381	0.9967747566766926	0.3285934160429905	T	T	T
0.6639201664723304	0.9985730405747004	0.3292403787616065	T	T	T
0.3223911604573674	0.3278421056064446	0.3276827589057827	T	T	T
0.6594023836273837	0.3289906073975298	0.3344826617521825	T	T	T
0.9967643128829251	0.3296979214327766	0.3280830284108696	T	T	T
0.3289651913587404	0.6653631038874653	0.3285868705695734	T	T	T
0.6594521623940184	0.6636155494153683	0.3344767623339786	T	T	T
0.0063607465197071	0.6697441911758250	0.3337904485949721	T	T	T
0.9073437596600799	0.6202331528392956	0.4349126772389187	T	T	T
0.6988693944573701	0.5160338556831492	0.4176658656924088	T	T	T
0.9587212034483291	0.7698675679234859	0.4622393353003281	T	T	T
0.9586510471946903	0.5218961431930871	0.4622201120085033	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH@Ni. Energy = -222.69881 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H

36 1 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2214973892339440	0.1107295231268968	0.2199514111653164	T	T	T
0.5535774587248872	0.1105407829602374	0.2207067490452641	T	T	T
0.8875057306766643	0.1100063194946802	0.2196237546032461	T	T	T

0.2218593345878458	0.4452644408107386	0.2201835459993901	T	T	T
0.5553232840899375	0.4444992217332336	0.2198538592123289	T	T	T
0.8902230985825664	0.4477672102611729	0.2209793198897860	T	T	T
0.5520386281613063	0.7750530051603360	0.2220066667029027	T	T	T
0.8903399808796710	0.7756277934607870	0.2218309538493465	T	T	T
0.2234357680516168	0.7778636669072508	0.2214926476980275	T	T	T
0.9966517800100124	0.0028069506932629	0.3290671804580405	T	T	T
0.3344686862005752	0.0102526969406247	0.3313320605641712	T	T	T
0.6677431737621985	0.0008500433732209	0.3285626141296483	T	T	T
0.3347585649374188	0.3355577240405013	0.3281973426642642	T	T	T
0.6674875013076066	0.3353289667858801	0.3285066066449019	T	T	T
0.9953949145804497	0.3264824053039058	0.3273629251585383	T	T	T
0.3371922486916651	0.6624501033937485	0.3350491006677095	T	T	T
0.6666486195132086	0.6660244161492648	0.3291050610487612	T	T	T
0.0016303913286017	0.6699334810570727	0.3364638770563261	T	T	T
0.1740172515932794	0.8436168764023367	0.4246196207247886	T	T	T
0.1743922420412194	0.6576733924518638	0.4172407404623639	T	T	T
0.3360870449939257	0.9867721683006015	0.4284333030660560	T	T	T
0.0714590759369697	0.8539193256431710	0.4654219685048921	T	T	T
0.0850172931027895	0.5421583631354134	0.4534961736540987	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH-CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Ni. Energy = -225.55787 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F

0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2233628708524833	0.1140282337032090	0.2223028726182719	F	F	F
0.5536620353160018	0.1131328082962995	0.2222653938408499	F	F	F
0.8888184229124079	0.1132635378240536	0.2202375347676195	F	F	F
0.2227781640556685	0.4483305336225740	0.2220733571797808	F	F	F
0.5548183360283190	0.4467260006123581	0.2217736845006755	F	F	F
0.8894417002735437	0.4481844058907924	0.2226784169903908	F	F	F
0.5533792151391594	0.7794017855554571	0.2221105650224473	F	F	F
0.8895342244266402	0.7793729885901612	0.2218101210891987	F	F	F
0.2224760467875129	0.7807946900730940	0.2223527972037616	F	F	F
0.9971992744270963	0.0049788408971096	0.3299741314570710	F	F	F
0.3311807416513659	0.0027949910691092	0.3361273761625796	F	F	F
0.6708629178688525	0.0071905711278220	0.3299779858273126	F	F	F
0.3322071630247692	0.3370298909139251	0.3334860397236241	F	F	F
0.6644759055746476	0.3357123419353698	0.3314556663898713	F	F	F
0.9977917769182270	0.3313558184977126	0.3312873058116850	F	F	F
0.3368191360132755	0.6712370198096238	0.3371408388395380	F	F	F
0.6685900419435100	0.6700237681472885	0.3303434408955184	F	F	F
0.9985572311853943	0.6717390959405876	0.3351555896389300	F	F	F
0.2042099901032735	0.7729961083705418	0.4264689536471482	T	T	T
0.2941153349168155	0.6538319170292705	0.4450161634441799	T	T	T
0.2813503067866272	0.9323988045497567	0.4495372538885702	T	T	T
0.0323393200178583	0.6912824641030739	0.4382052152251648	T	T	T
0.4441308139001546	0.7383373642575902	0.4636022809222519	T	T	T
0.2456433245111861	0.4736658093432247	0.3972535571923341	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH\_to\_CH<sub>3</sub>NH@Ni. Energy = -226.01634 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H  
36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F

0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2232704892012920	0.1132338129898001	0.2202305303066074	T	T	T
0.5551223723295025	0.1129540815297955	0.2197168797852780	T	T	T
0.8903627968787747	0.1131171668188621	0.2195241244578190	T	T	T
0.2254600857418947	0.4463955005259306	0.2217696547572324	T	T	T
0.5565604456824295	0.4470822213959639	0.2203697101328358	T	T	T
0.8897226529955521	0.4468453617859097	0.2200279414522649	T	T	T
0.5551125091591070	0.7787072505217172	0.2204345198421105	T	T	T
0.8871226395594851	0.7776798370540856	0.2212873807786246	T	T	T
0.2246534845041379	0.7781363158462441	0.2222959301249395	T	T	T
0.9994685085302887	0.0029934091634037	0.3280794330914124	T	T	T
0.3345021109345928	0.0033120237036444	0.3299613419037502	T	T	T
0.6723744673115029	0.0114886197312847	0.3272943677112971	T	T	T
0.3314610618910420	0.3284934340546930	0.3333969205935262	T	T	T
0.6708963592473880	0.3360880002918135	0.3289831172133286	T	T	T
0.9983010871989324	0.3369664083848549	0.3279743510379576	T	T	T
0.3366134204048021	0.6747296693776262	0.3356765474104370	T	T	T
0.6700083562739982	0.6771029458506089	0.3335515731082659	T	T	T
0.0010006818549976	0.6706687985735837	0.3292554235073212	T	T	T
0.3954589936731305	0.4261788240923591	0.4408786520432750	T	T	T
0.4835997433699838	0.6352619910655896	0.4146598661980365	T	T	T
0.5556783626808386	0.7467516389730149	0.4541368392595543	T	T	T
0.2342472234157277	0.3539405049122239	0.4600717470555498	T	T	T
0.4933899265135751	0.4075975149496555	0.4818700381129594	T	T	T
0.4368993654446831	0.2738619769386066	0.3961289119784783	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Ni. Energy = -226.68269 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H

36 1 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F

0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2240823459142553	0.1140496109481690	0.2213701763257643	T	T	T
0.5568186739655069	0.1139952855935011	0.2209925851293328	T	T	T
0.8889178653042306	0.1113600640252785	0.2199194009710244	T	T	T
0.2230752015452510	0.4421852244721032	0.2221903273509829	T	T	T
0.5545265724529316	0.4430446242574227	0.2218108497074483	T	T	T
0.8860680965061020	0.4427519971542248	0.2214200413928411	T	T	T
0.5548068980049509	0.7776989377557828	0.2199562608113591	T	T	T
0.8893711420583006	0.7777200684499938	0.2197820412446265	T	T	T
0.2217280174032168	0.7772598578992403	0.2197841479378389	T	T	T
0.9981940879093885	0.9989383292890593	0.3284837749210737	T	T	T
0.3316982255430044	0.9945901472812463	0.3276796759692669	T	T	T
0.6671456406400157	0.0004838073775181	0.3288406850995160	T	T	T
0.3330141057180131	0.3335316656880018	0.3378221662488729	T	T	T
0.6636151830697129	0.3334016270347339	0.3382289771234907	T	T	T
0.9975671143588456	0.3326847945193401	0.3293069285173361	T	T	T
0.3328904519913012	0.6680173524718361	0.3287922880703569	T	T	T
0.6697851258119246	0.6725638502241476	0.3276704551776012	T	T	T
0.9999200273358757	0.6665874303225529	0.3287683281493177	T	T	T
0.5876915044341101	0.3325975235327106	0.4406137482463212	T	T	T
0.3900283832636760	0.3315083746702626	0.4438219352082736	T	T	T
0.5735769741078256	0.1929100653697415	0.4662343889295230	T	T	T
0.4014417159052282	0.4604986505323233	0.4682062527529471	T	T	T
0.7123875483722484	0.4734834856565630	0.4659606134206216	T	T	T
0.2728343914149500	0.2010888124361418	0.4676318158806668	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH@Ni. Energy = -226.7491 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H

36 1 1 4

## Selective dynamics

### Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2229686874198710	0.1148533394696360	0.2223014175473287	T	T	T
0.5547657169303757	0.1102405900958280	0.2198910534521689	T	T	T
0.8889862606014944	0.1109562290257069	0.2200079698418534	T	T	T
0.2231907999648064	0.4434581934318158	0.2204969687723623	T	T	T
0.5548650521985911	0.4450187378318673	0.2214229438249347	T	T	T
0.8897646876831146	0.4452491190785859	0.2198982085553350	T	T	T
0.5564641693910337	0.7766510258044477	0.2204724635047855	T	T	T
0.8851717851281506	0.7770285814492330	0.2222862627237066	T	T	T
0.2211382080214502	0.7788605945580735	0.2193500914157878	T	T	T
0.9999865822877947	-0.0000677209158374	0.3299293662584709	T	T	T
0.3330051725869639	0.9988644622654504	0.3289497511102542	T	T	T
0.6678563699126192	0.9994681002990964	0.3288021901682268	T	T	T
0.3359966938373721	0.3333619299666200	0.3369532765763204	T	T	T
0.6716114628665018	0.3283107449797510	0.3275581607276462	T	T	T
1.0004382508924290	0.3321339874266604	0.3288472529804636	T	T	T
0.3289565142245863	0.6710653443077789	0.3261723193627617	T	T	T
0.6665622970411444	0.6637350796368821	0.3368990855606136	T	T	T
0.0011299428043012	0.6669651322214141	0.3289500812518368	T	T	T
0.5680222391250915	0.4323810922666031	0.4788997339986874	T	T	T
0.4926658461999736	0.5074229968881309	0.4181845303136024	T	T	T
0.4199058654464400	0.5804657237677965	0.4408748206076814	T	T	T
0.4377986916199654	0.3227690089534619	0.5135005468724951	T	T	T
0.6791648855210851	0.5629488289639119	0.5130403570883868	T	T	T
0.6470236657140928	0.3517295186799921	0.4574134103956007	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Ni. Energy = -229.8816 eV.

2.48430000000000  
3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000  
-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000  
0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H  
36 1 1 5

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2215077229922294	0.1121639482728049	0.2209583805903134	T	T	T
0.5556032388010429	0.1145960393865129	0.2219059378321129	T	T	T
0.8867294923055736	0.1101537143971168	0.2198662067257513	T	T	T
0.2209995906378628	0.4417012015038406	0.2214949492410069	T	T	T
0.5523516607646678	0.4426362270192448	0.2212625919227955	T	T	T
0.8851697499783954	0.4426993878021840	0.2211611596960046	T	T	T
0.5531529914938921	0.7766353130593102	0.2197673801761266	T	T	T
0.8876496047870321	0.7764788612516855	0.2196413219227542	T	T	T
0.2195724918375075	0.7759903039786360	0.2195653529316624	T	T	T
0.9948816830549465	0.9973355631455378	0.3284006374130548	T	T	T
0.3262330678358679	0.9907329401878568	0.3273032169290736	T	T	T
0.6625019239105161	0.9958360773880289	0.3287194799777494	T	T	T
0.3258838476557203	0.3295179425994172	0.3352139479231540	T	T	T
0.6616979735855144	0.3301452139219314	0.3371710714407796	T	T	T
0.9951770387505849	0.3294762734508613	0.3284646474067084	T	T	T
0.3287648220246152	0.6655777487692565	0.3283961296542812	T	T	T
0.6671519109093980	0.6720697006908884	0.3277762585812118	T	T	T
0.9965672699428089	0.6656021842535668	0.3300582994439192	T	T	T
0.5934489041203498	0.3540176028788052	0.4472416018744557	T	T	T
0.3860031351616674	0.3296255723930130	0.4428058381792607	T	T	T



0.5863425125050161 0.2055758391372070 0.4574877331399277 T T T  
0.6898440018809071 0.4665030375897021 0.4892558940590225 T T T  
0.3761709430609957 0.4472642770146900 0.4678976548534191 T T T  
0.2742332510015883 0.1901397979598400 0.4634503809646259 T T T  
0.7362750421726770 0.5150546209866467 0.3931253524956642 T T T

CH<sub>3</sub>NH\_to\_CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Ni. Energy = -229.54082 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H  
36 1 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2223867102033019 0.1109514474527816 0.2202537541765818 T T T  
0.5536700990972915 0.1110335851865660 0.2209939365921970 T T T  
0.8890841299297066 0.1136202553283031 0.2197912387251424 T T T  
0.2255459497720559 0.4447766279331756 0.2221495192921567 T T T  
0.5539795570596189 0.4437832115201099 0.2204568913871123 T T T  
0.8915407024708958 0.4455823288537817 0.2198242877507683 T T T  
0.5563222242305258 0.7789599721768605 0.2201998253800857 T T T  
0.8889880900608970 0.7761637417789273 0.2193915863602016 T T T  
0.2258432631460454 0.7823817033258765 0.2224083896345516 T T T  
0.9878778530296441 0.9935364713866508 0.3255218232631814 T T T  
0.3338131551762737 0.0039094277897434 0.3369701807229946 T T T  
0.6664755627944539 0.0008459905735149 0.3290398682447879 T T T  
0.3343304387737923 0.3335448232265447 0.3339404856848792 T T T

0.6775600884234607	0.3385440177513219	0.3271505703750084	T	T	T
0.0028031360897963	0.3344324052613177	0.3313118440735814	T	T	T
0.3355083068728235	0.6708109706350353	0.3301405454326846	T	T	T
0.6676318118791634	0.6680477976191066	0.3284976352305066	T	T	T
0.0011226372499310	0.6675732061805190	0.3291930699793220	T	T	T
0.4710435049869445	0.2531919094681152	0.4815369248586011	T	T	T
0.3114357288891465	0.1620930442287696	0.4236287956166481	T	T	T
0.6260223412757360	0.3351902169484000	0.4562993173370274	T	T	T
0.4613135162390249	0.1282760586114718	0.5164496074289981	T	T	T
0.2146059766362066	0.2865007673929328	0.4072162262964729	T	T	T
0.1729683466495577	0.0553382393268931	0.4468954208565842	T	T	T
0.4506378513044603	0.3639862702504700	0.5153803727727706	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Ni. Energy = -230.81181 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H

36 1 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2231180366405137	0.1142578999054250	0.2222323462189905	T	T	T
0.5546761559337068	0.1108677943863681	0.2201322716222799	T	T	T
0.8883513345896775	0.1110123421237288	0.2199871163911629	T	T	T
0.2233294123486641	0.4427059264125285	0.2221745901846245	T	T	T
0.5516406419364389	0.4425306038751361	0.2223409866211213	T	T	T
0.8885872252592070	0.4447341547127399	0.2198861781972322	T	T	T

0.5549991890445531	0.7774909024998721	0.2200780635378582	T	T	T
0.8884388225339713	0.7772777244957048	0.2198927232837045	T	T	T
0.2214015603977200	0.7776522701884205	0.2199497831337176	T	T	T
0.9959759649461151	0.9972566789193061	0.3284284589715407	T	T	T
0.3328995572268608	0.9980309148367722	0.3288711177986167	T	T	T
0.6658793261707453	0.9997266162934508	0.3296782264814491	T	T	T
0.3336328844333400	0.3335770996878889	0.3406367803907305	T	T	T
0.6681582198753412	0.3324914888842668	0.3285955997933530	T	T	T
0.9963380078335855	0.3325343689761015	0.3283828899473222	T	T	T
0.3331577088180314	0.6697048914412256	0.3285028693290999	T	T	T
0.6678563790230843	0.6690158674112896	0.3287507158467141	T	T	T
0.9991254464188755	0.6665488034310724	0.3292959449232020	T	T	T
0.4905287297588843	0.3597666404799925	0.4976252887618676	T	T	T
0.3143863585030295	0.3315809005086059	0.4517839135234649	T	T	T
0.5260144796691276	0.2371194205868633	0.4844540562119298	T	T	T
0.4551380609111162	0.3544808592312698	0.5564827184831210	T	T	T
0.2784016388931835	0.4446687106779960	0.4634699638387203	T	T	T
0.1845598331726112	0.1928953457808751	0.4639227769784398	T	T	T
0.6271114377038307	0.5094181001681146	0.4842261232705855	T	T	T

MeOH@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -237.83654 eV.

2.786000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F

0.1111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2217159638964143	0.1103245950372149	0.2196833307884827	T	T	T
0.5551392809459266	0.1106794417816950	0.2197072753185636	T	T	T
0.8888560890675042	0.1110791853249680	0.2200065470156306	T	T	T
0.2214365960406655	0.4443399954736206	0.2196571838136323	T	T	T
0.5565768517239947	0.4462163586289874	0.2210873619812441	T	T	T
0.8887136773163633	0.4439413303053582	0.2198955250966481	T	T	T
0.5562513771997918	0.7765215675061991	0.2213326053711803	T	T	T
0.8867327253788074	0.7766970726194827	0.2213935625748252	T	T	T
0.2220831033817974	0.7776998312795921	0.2196448005937273	T	T	T
0.0011270956960138	0.0006725922545779	0.3301780785094361	T	T	T
0.3326621993215923	0.9994377710242839	0.3305681846932985	T	T	T
0.6657098251643692	0.0006798314229633	0.3298085561008389	T	T	T
0.3306481926712590	0.3306125441676503	0.3287886629366000	T	T	T
0.6656414791462637	0.3307042465054016	0.3296241191319413	T	T	T
0.9994055048456207	0.3326604718557353	0.3300749514008607	T	T	T
0.3312531845266410	0.6663952435152709	0.3296705944973806	T	T	T
0.6654966790004669	0.6652278028115413	0.3355760627783883	T	T	T
0.0010684366068893	0.6663841835067703	0.3296100729659405	T	T	T
0.4475120265473441	0.1778781054811028	0.5107999346106576	T	T	T
0.3941291930381817	0.3012292862937723	0.4824906446147900	T	T	T
0.5371742692914041	0.1534991695697068	0.4775338214890178	T	T	T
0.5235990882549650	0.2434538762724001	0.5558253858141283	T	T	T
0.3253772848598012	0.0442657555577919	0.5233818731553228	T	T	T
0.3354675696502230	0.2498000521216570	0.4396649231992384	T	T	T
0.6644516665521621	0.6624191321920980	0.4384552192150035	T	T	T
0.7953523311693907	0.7022049136482077	0.4542009262868679	T	T	T
0.5714015007970417	0.5312937389812052	0.4565492117589554	T	T	T
0.6286581969832165	0.7560263731833459	0.4548046948196380	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>OH@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -237.1191 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2206957011063274	0.1076854292479428	0.2193467245523758	T	T	T
0.5566277617519769	0.1139772407261134	0.2225659835448990	T	T	T
0.8877277136856778	0.1090477226793677	0.2196818117158895	T	T	T
0.2209607185700381	0.4449794338662038	0.2200523233819476	T	T	T
0.5548390772185086	0.4430895914869172	0.2199949656751554	T	T	T
0.8866848948911895	0.4426963779898659	0.2206797847911089	T	T	T
0.5534194743126946	0.7760914902073377	0.2209472549361478	T	T	T
0.8884645464346327	0.7763151862674935	0.2195386380033676	T	T	T
0.2233887775274148	0.7753924934806671	0.2215214050922454	T	T	T
0.9975937011201456	0.9968849780371595	0.3302945050491515	T	T	T
0.3283588880002744	0.9956977312976903	0.3310222186161620	T	T	T
0.6656643230044882	0.9965484077276658	0.3301868427820219	T	T	T
0.3259250916751728	0.3257744702500721	0.3272184716384536	T	T	T
0.6615144111024518	0.3278792803294181	0.3355937236390831	T	T	T
0.9964608550266875	0.3281598084796865	0.3292224369292991	T	T	T
0.3314607151206340	0.6625396938417629	0.3353993971938649	T	T	T
0.6668238575302787	0.6660368560459142	0.3299275966463748	T	T	T
0.9993974086482764	0.6654905576287140	0.3300190127767491	T	T	T
0.6503978438880166	0.3758389044191788	0.4432259446034195	T	T	T
0.4751117713282149	0.3375850568654503	0.4630587845667397	T	T	T
0.7542202425451644	0.4920370418420131	0.4720044368381925	T	T	T
0.3836764679258184	0.2328810679851966	0.4361174370969501	T	T	T
0.6741662640527457	0.2575712801726096	0.4461223185787701	T	T	T
0.7126877191085383	0.5109853887418085	0.3867069396567847	T	T	T
0.3453568678833129	0.6410847372411561	0.4391910301527464	T	T	T
0.2174904262237287	0.5974372324044931	0.4587926320304978	T	T	T
0.4370425559827337	0.7682226864390315	0.4577701393861611	T	T	T
0.3881304615226391	0.5484565998172247	0.4508415760337325	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>3</sub>O@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -236.98949 eV.

2.786000000000000

2.9999999999999996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.4999999999999998	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495283

Pd C O H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.44444444444444358	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.2252576149028850	0.1117825894223015	0.2194846489328834	T T T
0.5592921037395203	0.1130322103666117	0.2203868218100860	T T T
0.8922789547093698	0.1116244363685791	0.2196736679819510	T T T
0.2252202765233406	0.4452191416958901	0.2198590049672187	T T T
0.5594035516514836	0.4447159097585970	0.2212405393899264	T T T
0.8901176923213867	0.4439842653001584	0.2212531602950502	T T T
0.5583152293747674	0.7777480043309538	0.2203736788287235	T T T
0.8896157249455474	0.7771596202826497	0.2216031706259483	T T T
0.2250788650430897	0.7778192203399510	0.2195204730464905	T T T
0.0099039934043213	0.0043625105422965	0.3298789355641634	T T T
0.3384756405803035	0.9989985299318144	0.3292622090514465	T T T
0.6731431005746725	0.0009094597992780	0.3292626080040663	T T T
0.3376395010084680	0.3352414718317981	0.3299461657806313	T T T
0.6736401367471452	0.3314055436640276	0.3337428093216541	T T T
0.0067175434157932	0.3339050902022038	0.3296816770932224	T T T
0.3385936696734883	0.6656408076087214	0.3320742776134927	T T T
0.6814112645712875	0.6733187671625193	0.3327869018364872	T T T
0.0110931092353886	0.6697690378116503	0.3298842923587043	T T T
0.6597499697818838	0.7860330105127057	0.4735707771646172	T T T
0.6022173538260327	0.6266690560660925	0.4343588974599380	T T T
0.6220771412748879	0.8830980739344868	0.4506335059454192	T T T
0.5909189393953320	0.7438285249123701	0.5216711288164300	T T T
0.8110108059421689	0.8600193588540157	0.4804316055757370	T T T
0.4428700508077372	0.5866380564214829	0.3858609984932604	T T T
0.6594070522944502	0.3323030237138856	0.4362398544993784	T T T

0.5504931576375705 0.2110203494775387 0.4526668248433113 T T T  
0.6402773631003499 0.4441976225091305 0.4473027672451974 T T T  
0.7792243393300119 0.3494670951043443 0.4561526590485602 T T T

0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00

0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00  
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00

CH<sub>2</sub>OH@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -233.91501 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Pd C O H N H

36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.999999938488742	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.9999999876977554	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.111111119389534	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.444444477558136	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777314186096	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.111111119389534	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.2222261533199311	0.1115271105283372	0.2194353855115182	T	T	T
0.5553736041657867	0.1109299823852727	0.2194736659916056	T	T	T
0.8883508025497743	0.1110748044999118	0.2193576345621176	T	T	T
0.222368485539200	0.4457146709352621	0.2212822099598630	T	T	T
0.5558188858817297	0.4460927602053189	0.2211722903688696	T	T	T
0.8885392075419549	0.4441734849461296	0.2193783358857390	T	T	T
0.5538058795974818	0.7752691862271349	0.2227889461017050	T	T	T
0.8869043909300138	0.7775938459256660	0.2201863880513705	T	T	T
0.2235301716319633	0.7776442751041552	0.2205746728885406	T	T	T
0.0006850463854902	0.0012594051383466	0.3290847696224381	T	T	T
0.3325836208482492	0.0008077511761052	0.3300237769699702	T	T	T
0.6649565369864898	0.0006204914540299	0.3294422010740362	T	T	T
0.3305833170048901	0.3307697631530604	0.3300500336139712	T	T	T
0.6647935873221273	0.3302902873675014	0.3293781207109659	T	T	T



0.9975060864643804	0.3311474347476835	0.3293331472243970	T	T	T
0.3279462476590796	0.6644501015718386	0.3375088217830754	T	T	T
0.6660938023798678	0.6657526615341690	0.3344949922803908	T	T	T
-0.0004501649752395	0.6664966856346231	0.3281857178467975	T	T	T
0.2871046998036799	0.6667205015461193	0.4356416668351049	T	T	T
0.4441019306991822	0.8072587058156098	0.4675445653718347	T	T	T
0.4736184902680523	0.9255301720587543	0.4469169071115273	T	T	T
0.2596266707859738	0.5330467298281041	0.4552503944068350	T	T	T
0.1662940786025303	0.6860295055122739	0.4401808914427661	T	T	T
0.6912897898437015	0.6735327302051235	0.4372742590347227	T	T	T
0.8277248412277852	0.7511436480703655	0.4497658305895846	T	T	T
0.6399998901166418	0.5423297611312141	0.4549088466620005	T	T	T
0.6177961584401189	0.7330990879551386	0.4557502615190450	T	T	T

CH<sub>3</sub>O@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -233.54602 eV.

2.786000000000000

2.9999999999999996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.4999999999999998	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H N H

36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2234579026732195	0.1130979772494439	0.2210183538363946	T	T	T
0.5559244009457779	0.1111616132996274	0.2194525448140365	T	T	T
0.8893058800770514	0.1111154385478323	0.2193209480518821	T	T	T
0.2246451799123250	0.4452148776734833	0.2222922469250244	T	T	T
0.5545288411348150	0.4433583401004205	0.2210864630096559	T	T	T

0.8894083662244450	0.4442794271434998	0.2193608121901963	T	T	T
0.5545697989421516	0.7771775842702914	0.2206829956415189	T	T	T
0.8894305571329357	0.7778598849003401	0.2191968406216740	T	T	T
0.2232308833169962	0.7763711428366438	0.2205148957275591	T	T	T
0.9995269770077020	0.9983239751056121	0.3297290840201663	T	T	T
0.3336038063335907	0.9990365858468578	0.3291299227354993	T	T	T
0.6696843402351882	0.0014871290078718	0.3289825952401773	T	T	T
0.3357604436031427	0.3296293532064208	0.3345781428886304	T	T	T
0.6698943248877544	0.3331279216733946	0.3294517630826178	T	T	T
0.9994205647398782	0.3320564014937086	0.3291404926752151	T	T	T
0.3336862986979073	0.6691603416431448	0.3337976588220334	T	T	T
0.6706759418261349	0.6682122641011414	0.3289079101713712	T	T	T
0.9991518122429289	0.6666511333560123	0.3294857824280242	T	T	T
0.4276416872544169	0.2656573933970479	0.4683223550241372	T	T	T
0.3343544193403881	0.3388457037959550	0.4331541083229345	T	T	T
0.4174870165546546	0.2900482861495727	0.5209690820708269	T	T	T
0.3649455433728136	0.1146748198130644	0.4605630659664739	T	T	T
0.5765640077383022	0.3321165100731417	0.4553625402685429	T	T	T
0.3362008500782966	0.6597380926226630	0.4359327889254908	T	T	T
0.4494389795069885	0.7742796776127551	0.4542120680001787	T	T	T
0.3418898975764035	0.5382380898207935	0.4456602787960331	T	T	T
0.2191658979289584	0.6516234903998168	0.4549243945441763	T	T	T

CH<sub>2</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>O@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -233.22908 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Pd C O H N H

36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F

0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2189957107868300	0.1094161350357145	0.2195722442240594	T	T	T
0.5510220169680048	0.1085788484281187	0.2194364645463271	T	T	T
0.8848211308703353	0.1104647262581344	0.2197297765127876	T	T	T
0.2186821551366330	0.4445422768827701	0.2212504529756329	T	T	T
0.5525280748698136	0.4438197303518403	0.2198483203824571	T	T	T
0.8855854353072642	0.4446376784378138	0.2212000445035661	T	T	T
0.5510816685844990	0.7747420617697606	0.2211439414625158	T	T	T
0.8885199751418953	0.7771476076385648	0.2202162363864428	T	T	T
0.2176419111579303	0.7727039228081660	0.2237155362525924	T	T	T
0.9931430663525065	0.0029890257123498	0.3310118764976133	T	T	T
0.3240710419149360	0.9976767558797970	0.3301332762705024	T	T	T
0.6606629893927549	0.9993212040572053	0.3300354486145300	T	T	T
0.3252621735066205	0.3286841300235716	0.3288566848068313	T	T	T
0.6567166863388738	0.3254751612671752	0.3289700334484271	T	T	T
0.9917030077826601	0.3313012308337839	0.3303687584258702	T	T	T
0.3237582113828067	0.6651248063351340	0.3365697851450191	T	T	T
0.6601499501133660	0.6622914355171490	0.3298378391580901	T	T	T
0.9853671269239076	0.6614973090958787	0.3385763733318249	T	T	T
0.8972771773937341	0.6700460913644517	0.4339367927669515	T	T	T
0.7636703839901015	0.7164053686249481	0.4335710584364025	T	T	T
0.0328002570446251	0.7801787226197425	0.4520249229547145	T	T	T
0.8501559552419020	0.5306660440361299	0.4537080808789712	T	T	T
0.8386907521456426	0.8821059030449401	0.3906545176752251	T	T	T
0.3638216675939542	0.6597437614737077	0.4397644845544327	T	T	T
0.3677375210705037	0.7722192553069216	0.4612477225871682	T	T	T
0.4865778536276103	0.6627375710406438	0.4487517059035035	T	T	T
0.2573126613459916	0.5417266601233526	0.4593252114255624	T	T	T

CH<sub>3</sub>O\_to\_CH<sub>2</sub>O@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -233.20057 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Pd C O H N H

36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333332728696163 0.3333332124058899 0.0000000000000000 F F F

0.6666666062029449 0.3333332124058899 0.0000000000000000 F F F

0.9999999395362806	0.3333332124058899	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333332124058899	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666665457392256	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.9999998790725613	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111113007303857	0.2222226014607713	0.1111113325119888	F	F	F
0.4444446340637214	0.2222226014607713	0.1111113325119888	F	F	F
0.7777779673970571	0.2222226014607713	0.1111113325119888	F	F	F
0.4444445736000020	0.5555558138666683	0.1111113325119888	F	F	F
0.7777779069333306	0.5555558138666683	0.1111113325119888	F	F	F
0.1111112402666663	0.5555558138666683	0.1111113325119888	F	F	F
0.4444445131362826	0.8888890262725582	0.1111113325119888	F	F	F
0.7777778464696112	0.8888890262725582	0.1111113325119888	F	F	F
0.1111111798029469	0.8888890262725582	0.1111113325119888	F	F	F
0.2219605436328213	0.1114680415454845	0.2205163209253251	T	T	T
0.5561739705205614	0.1134409100484977	0.2212632490118044	T	T	T
0.8877573700772795	0.1099679717513409	0.2193163290951746	T	T	T
0.2228756954775352	0.4432755631105599	0.2225001237499874	T	T	T
0.5542275405283992	0.4433947134804678	0.2197575379191383	T	T	T
0.8869434582970418	0.4427555704249124	0.2200898686430539	T	T	T
0.5530122626200304	0.7765070600237232	0.2209080522687574	T	T	T
0.8889139663439950	0.7770439096952059	0.2189884862521098	T	T	T
0.2222534927543478	0.7748940430884443	0.2205969392498075	T	T	T
0.9951168818119824	0.9963011226333446	0.3294409241391649	T	T	T
0.3259317305871059	0.9929413472178367	0.3289730530620869	T	T	T
0.6647512036708946	0.9982475073690928	0.3293981128435432	T	T	T
0.3263713445369459	0.3259811704357288	0.3331983993228249	T	T	T
0.6599758142814443	0.3285827088211289	0.3331167797226120	T	T	T
0.9936396666899010	0.3285164794759425	0.3294626468232944	T	T	T
0.3285382940773661	0.6653467494571779	0.3346415931800581	T	T	T
0.6663905031377850	0.6678019337415958	0.3287575311465336	T	T	T
0.9956725108984867	0.6641286805286869	0.3299042602840855	T	T	T
0.5700522025435433	0.3779415275834182	0.4406901704869157	T	T	T
0.4013947424254812	0.3536966168056073	0.4334488999313195	T	T	T
0.5821811784114501	0.2522647756200773	0.4457036269563726	T	T	T
0.6947660768017756	0.4991887866261591	0.3898024906007337	T	T	T
0.6602144333291795	0.4871610062177600	0.4756639123204946	T	T	T
0.3343292221444565	0.6502799538020496	0.4375241125308510	T	T	T
0.3612705737826823	0.5432178057287843	0.4471498460405253	T	T	T
0.2099258151343284	0.6215633988498711	0.4568704535664291	T	T	T
0.4360732348767313	0.7724491269834354	0.4563385730803706	T	T	T

CH<sub>2</sub>O@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -229.98865 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Pd C O H N H  
36 1 1 2 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.999999938488742	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.999999876977554	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.111111119389534	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.444444477558136	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.777777314186096	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.444444477558136	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.111111119389534	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.2210184757939914	0.1092031902509883	0.2198429391791531	T	T	T
0.5556334986909769	0.1110917240380087	0.2198787461158548	T	T	T
0.8878738402505917	0.1102370101626578	0.2188557902893896	T	T	T
0.2192870970275133	0.4429559303933220	0.2190699036293511	T	T	T
0.5541606329076254	0.4412173089005575	0.2209144262753086	T	T	T
0.8859873057027660	0.4452279711882242	0.2235640979009744	T	T	T
0.5537850197990010	0.7748915006466249	0.2190590362487955	T	T	T
0.8871939612491311	0.7743719761528413	0.2211264748537169	T	T	T
0.2200095177027709	0.7783637148556005	0.2218793766948412	T	T	T
0.9945449367697543	0.9973971445818961	0.3282063248350088	T	T	T
0.3309119072077818	0.9979086702447943	0.3313978758466919	T	T	T
0.6646265621540257	0.9942829465561852	0.3282181351738221	T	T	T
0.3264886751520112	0.3322357796296291	0.3282842486223524	T	T	T
0.6555098557420213	0.3225969452957567	0.3378931180246146	T	T	T
0.9941499998753054	0.3276405944884259	0.3299709338858579	T	T	T
0.3304316806315672	0.6620856773988723	0.3287427414372274	T	T	T
0.6609899218035346	0.6617305842074694	0.3296995339290407	T	T	T
0.9935404400741342	0.6596705090895971	0.3363195591771670	T	T	T
0.5512764448777434	0.2183016851648181	0.4325467400520954	T	T	T
0.3916945831778890	0.0605641899201310	0.4296773331818433	T	T	T
0.5433198278729980	0.3396794876558644	0.4502715389414300	T	T	T
0.6708925402734794	0.2075103634014557	0.4504462249914546	T	T	T
0.0329055897436165	0.7037179344645667	0.4389040052473122	T	T	T
0.1556478354003006	0.8240081116127588	0.4477940610293317	T	T	T

0.0368715610210651 0.5947906318386774 0.4600220836168137 T T T  
0.9259981749763077 0.7143710631342763 0.4585292810741021 T T T

CH<sub>2</sub>NH@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -235.50716 eV.

2.786000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H N H

36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F

0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F

0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F

0.2217530546699989 0.1108746068010450 0.2191570921874927 T T T

0.5528945400613727 0.1088222537931563 0.2191653475195606 T T T

0.8878938044152636 0.1122954158575016 0.2193520813308387 T T T

0.2215119813953105 0.4462806161644309 0.2213611368707876 T T T

0.5548533160472462 0.4447170344273221 0.2200540401965941 T T T

0.8885231761019440 0.4462343606172898 0.2210001044022183 T T T

0.5547726702741222 0.7745507803797022 0.2225441818014773 T T T

0.8888206972264794 0.7776206870328877 0.2205971475009348 T T T

0.2196752741342349 0.7739654567569401 0.2235467520883097 T T T

0.9983400978396603 0.0028782073073232 0.3286965683885931 T T T

0.3286050152475050 0.0000110191797237 0.3302585280912777 T T T

0.6647141038253660 0.0013576559041060 0.3292361923253073 T T T

0.3281792911336991 0.3298515651197181 0.3287514771157103 T T T

0.6611393917049816 0.3269656277404557 0.3282526244260143 T T T

0.9953022448082948 0.3318193783458127 0.3301118707158942 T T T

0.3275958865966061 0.6670011600268212 0.3365028427905197 T T T

0.6639112164030352	0.6651951179333505	0.3335659148153748	T	T	T
0.9920679156238429	0.6664416049279694	0.3381239076471209	T	T	T
0.8980562660637065	0.6775108420116251	0.4342915289641567	T	T	T
0.7125932335912859	0.6210053813752993	0.4296369436858335	T	T	T
0.9346632304725080	0.5839310078170468	0.4596809440061421	T	T	T
0.6368448423808298	0.4793403313326570	0.4357779157111829	T	T	T
0.9880036889657269	0.8254152983596323	0.4445148219860702	T	T	T
0.3701525949677766	0.6731644465968550	0.4394696946946713	T	T	T
0.3748638794938794	0.7880177975099218	0.4591195349780974	T	T	T
0.4947842468847763	0.6776729033081367	0.4474078423046753	T	T	T
0.2652665916477857	0.5574648025394211	0.4608284124118723	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -238.49825 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2210600853437819	0.1115815951132878	0.2195422387441492	T	T	T
0.5577832981404498	0.1145839817478202	0.2203250336362499	T	T	T
0.8891674445994915	0.1112827613249663	0.2205683004681902	T	T	T
0.2217505075269904	0.4430504367311175	0.2207912447323841	T	T	T
0.5563367305747872	0.4458504118792621	0.2204335918998654	T	T	T
0.8856815540204520	0.4455294349865555	0.2233344262347601	T	T	T
0.5551690441094933	0.7791073263258605	0.2194979530784180	T	T	T

0.8906450519327419	0.7792117467409556	0.2218236410568582	T	T	T
0.2185863949206698	0.7744986854220339	0.2196087604192066	T	T	T
0.0051395618968398	0.0078470213519147	0.3346266986854360	T	T	T
0.3307835537532258	0.9936323149158914	0.3260478471255229	T	T	T
0.6664798982508107	0.0015915051057775	0.3300586354218495	T	T	T
0.3325101947188026	0.3380680097295969	0.3306414106080309	T	T	T
0.6542500138952725	0.3314446295632656	0.3392895279054021	T	T	T
0.9936903934670007	0.3335269302089103	0.3303772394718729	T	T	T
0.3331491489978063	0.6680277357908453	0.3293107645270512	T	T	T
0.6670021712975543	0.6728388382724961	0.3294979479055578	T	T	T
0.9959379672006622	0.6661576204670863	0.3356216579766499	T	T	T
0.5205844981624903	0.2752661031510953	0.4318684188144744	T	T	T
0.3578253203293143	0.2818804810940809	0.4307194911628349	T	T	T
0.4988387456783537	0.1345364861747149	0.4375648580942276	T	T	T
0.3694824808977276	0.4010825508841665	0.4495936104948924	T	T	T
0.6291505031517157	0.3790564002687964	0.4636800135373300	T	T	T
0.1889544640657237	0.1442221210481046	0.3901221513586802	T	T	T
0.0162545144602906	0.6864250069778782	0.4403556840676420	T	T	T
0.1501159494962429	0.7772970063266036	0.4531704939227113	T	T	T
0.9768050768223223	0.5594792055411631	0.4600264402613233	T	T	T
0.9329366624746509	0.7346726237208605	0.4572360415424562	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH\_to\_CH<sub>3</sub>NH@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -238.37013 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F



0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2202717554123680	0.1120623976382715	0.2209093794610451	T	T	T
0.5552055939194441	0.1146498012024114	0.2193799981074461	T	T	T
0.8909615399542659	0.1121355609313371	0.2206859082934254	T	T	T
0.2232670111516178	0.4455656980531884	0.2207455104958529	T	T	T
0.5567936563078619	0.4470321582016549	0.2194880239962781	T	T	T
0.8877801456077992	0.4454710760137744	0.2200796437574321	T	T	T
0.5550151847363519	0.7805267437154562	0.2192833537559145	T	T	T
0.8872908036871797	0.7789098518786293	0.2227722865054844	T	T	T
0.2236565713022880	0.7761575822928084	0.2222203164516008	T	T	T
0.0005846732789415	0.0061700503263925	0.3350798934599539	T	T	T
0.3348455904468567	0.0037873137623780	0.3297793220618938	T	T	T
0.6698989694804575	0.0140659454598000	0.3279007262082886	T	T	T
0.3323861111259089	0.3308013640589854	0.3305416957026997	T	T	T
0.6691273364845266	0.3412895202450847	0.3324212470812454	T	T	T
-0.0001364896494536	0.3412409609095523	0.3291886606308094	T	T	T
0.3352613377377482	0.6782517336060163	0.3336269694271453	T	T	T
0.6725653568685838	0.6818079723204936	0.3307650219912263	T	T	T
0.0016160492936071	0.6712751206392545	0.3306050385212631	T	T	T
0.4148618619153547	0.4543866398931513	0.4296100818524263	T	T	T
0.4861229967525232	0.6383506763686090	0.4057023882051592	T	T	T
0.5453158464854722	0.7401701981349869	0.4403050686948608	T	T	T
0.2685641462984700	0.3846245724035254	0.4443420610607662	T	T	T
0.5001948374153751	0.4440697280810859	0.4685919526412847	T	T	T
0.4815826845522435	0.3465496679855977	0.3897156392980802	T	T	T
0.0075658423567302	0.9951553926341377	0.4403851832838336	T	T	T
0.9705792770294110	0.0833458003444288	0.4611437106990068	T	T	T
0.9184946603505033	0.8624815197393910	0.4549761150867689	T	T	T
0.1386457573666179	0.0301299689910866	0.4544529670597970	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub> @Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -239.49644 eV.

2.786000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2210117142964732	0.1118069706943924	0.2197340856155588	T	T	T
0.5557757929387064	0.1128639484301263	0.2202955494686611	T	T	T
0.8871143291372279	0.1111103209636734	0.2195804156038377	T	T	T
0.2206899681872082	0.4420237190497929	0.2209790264366152	T	T	T
0.5545104039836750	0.4440563069887046	0.2200028926457900	T	T	T
0.8855528937366222	0.4444361997045541	0.2227097208633594	T	T	T
0.5541000862166745	0.7780836293473710	0.2191884603800828	T	T	T
0.8889291992769431	0.7767592680825853	0.2203646659051601	T	T	T
0.2189420767544037	0.7752872591112194	0.2195336532717831	T	T	T
0.9957763161938566	1.0001651929914035	0.3289426239990530	T	T	T
0.3291346748521614	0.9951880003945127	0.3273055228067820	T	T	T
0.6631758214124578	0.9989790639960379	0.3299047095400293	T	T	T
0.3297063226815982	0.3333566586582523	0.3315069778390589	T	T	T
0.6557299820591367	0.3298505407393449	0.3363501208307441	T	T	T
0.9938085171716897	0.3300922688550149	0.3304024366794686	T	T	T
0.3317883881621215	0.6662613017249762	0.3292204141727772	T	T	T
0.6645498354075490	0.6698869203969664	0.3283926896480812	T	T	T
0.9958758540299202	0.6642687705648679	0.3336473058074281	T	T	T
0.5634988656745669	0.3136262140546586	0.4303422878534219	T	T	T
0.3987329379689671	0.3293896614730569	0.4314835001521838	T	T	T
0.5354843704050685	0.1787914128018667	0.4487290514769188	T	T	T
0.4176191574468736	0.4520949987841111	0.4491161271565059	T	T	T
0.6774811546063593	0.4298003680733781	0.4560472093532034	T	T	T
0.2835107650041590	0.2185375323046852	0.4504672547796499	T	T	T
0.0291914952165843	0.6857187825830593	0.4380254788565483	T	T	T
0.1669383319642565	0.7717545244885821	0.4470686338371547	T	T	T
0.9882904507947201	0.5578964733842392	0.4571622912443618	T	T	T
0.9538383856336122	0.7401326766453402	0.4573667063938967	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH@ Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -239.2436 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2238790036768294	0.1147074152319311	0.2231931730852801	T	T	T
0.5563418349681073	0.1087092378727908	0.2191968573121706	T	T	T
0.8901311365285614	0.1099430493912932	0.2200508346249430	T	T	T
0.2234190858380553	0.4431039273467512	0.2195877215273088	T	T	T
0.5565176694995245	0.4432846870824925	0.2203203237355187	T	T	T
0.8926099639801259	0.4464856223989940	0.2207054306285011	T	T	T
0.5583322414320206	0.7770780950785660	0.2196846184840354	T	T	T
0.8861729710987621	0.7749999171257406	0.2247142252165245	T	T	T
0.2194588804951222	0.7789224645071823	0.2194170950955464	T	T	T
0.0024595538836801	0.9987771401225380	0.3319627526978735	T	T	T
0.3384793088781726	0.9980323620893701	0.3302935826561752	T	T	T
0.6701518574780957	0.9967150969120410	0.3305630948985993	T	T	T
0.3365134618880434	0.3271511752330352	0.3342084898598593	T	T	T
0.6722673683003989	0.3251520557420034	0.3279595428127097	T	T	T
0.0035762735194183	0.3286815471685643	0.3297301144955621	T	T	T
0.3337691314561687	0.6694795397765531	0.3253918564976179	T	T	T
0.6709470636370628	0.6615356905025853	0.3352243952813620	T	T	T
0.0050694989235288	0.6646036118408301	0.3353475365677092	T	T	T
0.5439330910607415	0.4341183576007269	0.4644059419270764	T	T	T
0.4884477495931178	0.5048079105731482	0.4086462377640543	T	T	T
0.4218908816570138	0.5721363292324920	0.4253848625225166	T	T	T
0.4217252315977863	0.3334464132142148	0.4922750611594851	T	T	T
0.6339777840025440	0.5476389629222808	0.4979189353707202	T	T	T

0.6177957885122819 0.3637628041667371 0.4471017075153846 T T T  
0.0246599312580178 0.6738745046527498 0.4398137838984766 T T T  
0.1566289256785952 0.7714067494972652 0.4523640634509952 T T T  
0.9950272711103205 0.5475340857341471 0.4575536750492023 T T T  
0.9337676999947898 0.7103544420694369 0.4584131005578719 T T T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -242.47468 eV.

2.786000000000000

3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000  
-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000  
0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495345

Pd C N H N H

36 1 1 5 1 3

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F  
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F  
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.11111111111111072 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2201507772957561 0.1108554633355562 0.2196434361057923 T T T  
0.5560887263256274 0.1134777077146738 0.2210896433284831 T T T  
0.8873060088723945 0.1102772114665378 0.2195550759195750 T T T  
0.2223567389275317 0.4437904654624035 0.2226337407057481 T T T  
0.5535960317262261 0.4437792376284993 0.2199480458155669 T T T  
0.8859292248904432 0.4424675254499551 0.2205541303091008 T T T  
0.5522140874349465 0.7763184061830603 0.2208726764951926 T T T  
0.8872433736131877 0.7769929002840228 0.2193173186439938 T T T  
0.2201147596473129 0.7744730068301918 0.2195085470014939 T T T  
0.9950392373490716 0.9971989775927791 0.3298903743475693 T T T  
0.3257912514078762 0.9934129898105408 0.3274806274875802 T T T  
0.6652495502766216 0.9986348639054426 0.3296135386575209 T T T  
0.3248766887391258 0.3294997997134256 0.3324445082049216 T T T

0.6602294164284991	0.3287222960967532	0.3333547052121749	T	T	T
0.9936026861824168	0.3293614583750826	0.3301848660899940	T	T	T
0.3287058789284802	0.6658673935940327	0.3338159162419232	T	T	T
0.6653999198907534	0.6683029452563680	0.3303054696213050	T	T	T
0.9957233471516299	0.6658242094047349	0.3296362302253861	T	T	T
0.5857594686266619	0.3539865391713595	0.4369308887648485	T	T	T
0.3922086085210978	0.2998165122090522	0.4340161896898513	T	T	T
0.6084053945375272	0.2370801325715433	0.4455193450656694	T	T	T
0.6616835220794732	0.4628646534430751	0.4730576078508160	T	T	T
0.3539328003175347	0.3692687194641464	0.4655408232429566	T	T	T
0.3055958238966615	0.1595858124703700	0.4379033454520289	T	T	T
0.6860950530020329	0.4986542036484650	0.3869437899181669	T	T	T
0.3226733497102026	0.6903471824334451	0.4386711700949341	T	T	T
0.2990059323345964	0.7979233707205768	0.4463851344866672	T	T	T
0.4471034728347421	0.7211020285899737	0.4586043586983655	T	T	T
0.2162050244735295	0.5723201174809739	0.4581794650974259	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -242.23639 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H N H

36 1 1 5 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2241462155063688	0.1126346321101262	0.2210228727683889	T	T	T
0.5571250748133579	0.1112587883917177	0.2194332281077327	T	T	T

0.8904694526025900	0.1115169994579484	0.2201132981176845	T	T	T
0.2235135490754128	0.4443706192037568	0.2206016634434887	T	T	T
0.5546785227778717	0.4435405505772528	0.2216485543897199	T	T	T
0.8913042452969137	0.4465689552207037	0.2208849564535040	T	T	T
0.5573185846135735	0.7783452621052981	0.2193951955153624	T	T	T
0.8913005716444394	0.7777346417252298	0.2209575104791884	T	T	T
0.2212165689922671	0.7770834960578291	0.2206750633658794	T	T	T
0.0018767421682844	0.0027566618421009	0.3318081284872516	T	T	T
0.3387300211424512	0.0008375679622244	0.3291672142785772	T	T	T
0.6676732584898747	0.9995275038134148	0.3303046803696253	T	T	T
0.3447208664988357	0.3386090408492812	0.3341021384420753	T	T	T
0.6710857324889551	0.3324060622979017	0.3296713619757238	T	T	T
0.0011610432277019	0.3304975674278519	0.3315556763707825	T	T	T
0.3384606276400827	0.6697165737454074	0.3288028851577297	T	T	T
0.6710966336530241	0.6701424004730929	0.3297708435036028	T	T	T
0.0039581491901608	0.6678902337108590	0.3345939702706137	T	T	T
0.3353617997250353	0.2310419007986152	0.4757743358697525	T	T	T
0.2675756224493878	0.3131885291829216	0.4289555185922656	T	T	T
0.3092966176338606	0.0962926946814331	0.4572162942496189	T	T	T
0.2634757301680212	0.2096974866655713	0.5231238612333102	T	T	T
0.2849522325772049	0.4374448901213763	0.4444749187284221	T	T	T
0.0648796158095867	0.1963517759882659	0.3842956270360240	T	T	T
0.4857658846019302	0.3161738512846083	0.4846042756321901	T	T	T
0.9951160508127158	0.6647307041490145	0.4394441707443293	T	T	T
0.1256156047247085	0.7168316401131399	0.4578662946306606	T	T	T
0.9132019620287521	0.5313716906075334	0.4548890522556892	T	T	T
0.9404241569880191	0.7438952009321591	0.4547895284203785	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Pd-NH<sub>3</sub>. Energy = -243.49495 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H N H  
36 1 1 5 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F

0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2237419678740931	0.1131084614942060	0.2209701604346605	T	T	T
0.5562244061960865	0.1107792001815429	0.2195526576605390	T	T	T
0.8887049341017231	0.1109205368927128	0.2195572957437716	T	T	T
0.2233648691893252	0.4440239237474113	0.2207637215004261	T	T	T
0.5536894119341423	0.4435348730633681	0.2212056634205656	T	T	T
0.8901488486536691	0.4465115454599599	0.2202578078171930	T	T	T
0.5561847561762511	0.7784070985097500	0.2196503264063180	T	T	T
0.8898692851673848	0.7770378019296776	0.2204091432845635	T	T	T
0.2208659771139161	0.7772341157542521	0.2206128130620419	T	T	T
0.9993068681535029	0.0003859835343213	0.3293019354658285	T	T	T
0.3365343476533503	0.0007156210842464	0.3296002567026262	T	T	T
0.6677430234503714	0.0002318637155484	0.3307653183771566	T	T	T
0.3362063260257229	0.3343060710427913	0.3340395544346180	T	T	T
0.6683708730995122	0.3318397319515406	0.3290323802346572	T	T	T
0.9989610398903452	0.3318951514144920	0.3290371611034901	T	T	T
0.3362933772399913	0.6690619830723830	0.3295094181906904	T	T	T
0.6681183571841063	0.6691962504909529	0.3295340354909733	T	T	T
0.0015138671866496	0.6673018491276091	0.3334024509252914	T	T	T
0.4545386935151075	0.3454296541789932	0.4812098191671998	T	T	T
0.3062517248651098	0.3305708955214124	0.4383610719503885	T	T	T
0.4845271872349437	0.2353975059678684	0.4686247988095242	T	T	T
0.4170431494072240	0.3359824421866071	0.5333363037201717	T	T	T
0.2811356231546566	0.4374214750825990	0.4456436644965747	T	T	T
0.1843659340543359	0.2094693192537443	0.4454346122769288	T	T	T
0.5793485937034338	0.4787170847193223	0.4717280830513850	T	T	T
0.0000803391514083	0.6694210541705671	0.4379178549418948	T	T	T
0.1340655441807255	0.7406973155250891	0.4537449006437621	T	T	T
0.9361984739092052	0.5361128717286294	0.4544691358644944	T	T	T
0.9297566384410714	0.7339109023142938	0.4529117908827240	T	T	T

MeOH@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -245.38287 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H N H

36 1 1 4 1 3

## Selective dynamics

### Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2216613666345669	0.1104191706519572	0.2199787601881271	T	T	T
0.5547851184709268	0.1105797630093613	0.2200022907431552	T	T	T
0.8882061223854013	0.1102374405994643	0.2202223582792857	T	T	T
0.2217181238459284	0.4442029575673633	0.2200007954149295	T	T	T
0.5568498104051826	0.4474047938771181	0.2221598829970537	T	T	T
0.8881682043236503	0.4440767234450709	0.2201578623153599	T	T	T
0.5563626612610768	0.7754210196985608	0.2222262957844001	T	T	T
0.8850249597226696	0.7758623736932990	0.2223144885831937	T	T	T
0.2218024844976961	0.7777158947887847	0.2199444048606334	T	T	T
0.0015784877362617	0.0019193930962452	0.3292484116101770	T	T	T
0.3321602026516577	0.9993574457843426	0.3294440203255491	T	T	T
0.6662873526615668	0.0019519387928480	0.3286809332520205	T	T	T
0.3294030212606042	0.3302777043714856	0.3282259664869541	T	T	T
0.6662780078151370	0.3303948454360389	0.3287512853331275	T	T	T
0.9989318564963143	0.3324929870654528	0.3296683345400119	T	T	T
0.3292852618103889	0.6655271492957148	0.3286655083674607	T	T	T
0.6649443929808324	0.6653988072964794	0.3408381660998988	T	T	T
0.0011233546353745	0.6656795067381518	0.3287596178197288	T	T	T
0.4260580348940368	0.1332163758167039	0.5390577426089022	T	T	T
0.3516894818961936	0.2554483499243438	0.5037851277987340	T	T	T
0.5402786313753107	0.1190718936736031	0.5046621740962133	T	T	T
0.5004517764247681	0.2125685825873852	0.5903479361198590	T	T	T
0.2978463637413808	0.9768868745890086	0.5523699773071630	T	T	T
0.2926307304194208	0.1917719115015459	0.4557345248315585	T	T	T
0.6621975044826037	0.6629460981223347	0.4507208649809868	T	T	T
0.8058767672926399	0.6994804693384273	0.4698066877954489	T	T	T



0.5531948689655146 0.5195020592637029 0.4721443003956085 T T T  
0.6299988292004381 0.7730603687640155 0.4699057885755808 T T T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>OH@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -244.5752 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F  
0.1111111111111072 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F  
0.2222247215468509 0.1102572648068124 0.2196915605436731 T T T  
0.5576500797874799 0.1153180802918329 0.2223645148666277 T T T  
0.8889736564251165 0.1107381642728984 0.2198102863379993 T T T  
0.2236396054423443 0.4477854320014953 0.2210052012154039 T T T  
0.5567404720737625 0.4440866191085563 0.2205041204713102 T T T  
0.8874064022366132 0.4438986255910193 0.2211832153907040 T T T  
0.5528020955231745 0.7762297628130840 0.2214945173170293 T T T  
0.8895420027041637 0.7778431412744073 0.2197480965367735 T T T  
0.2235302363181960 0.7751796782160855 0.2220588579044377 T T T  
0.0016720292876577 0.0009599646912857 0.3298064338539684 T T T  
0.3309954737860250 0.9988472158661230 0.3283863521671652 T T T  
0.6699575310458656 0.0007522815162257 0.3280048004598535 T T T  
0.3294678659301400 0.3284992117840006 0.3265856082293621 T T T  
0.6665366918496122 0.3334584044888259 0.3397516821724463 T T T  
0.9996634520845759 0.3294329247112475 0.3277353969235874 T T T  
0.3351210076585844 0.6655315174392176 0.3392081586749613 T T T

0.6716339248437042	0.6705338670805583	0.3281148868719546	T	T	T
0.0002765303485785	0.6682706935209199	0.3293776745633141	T	T	T
0.6567442071576715	0.3594391423194707	0.4548436727813415	T	T	T
0.4589815817649029	0.3156978177389423	0.4780106419702579	T	T	T
0.7708020558205728	0.4830243600271537	0.4902155971954058	T	T	T
0.3568536898495376	0.2065752785789045	0.4446782914072005	T	T	T
0.6814509552868839	0.2253963514585842	0.4567703864649339	T	T	T
0.7484701771537468	0.5244765710122448	0.3937162003430943	T	T	T
0.3450258683707436	0.6520657096763730	0.4493762128145461	T	T	T
0.2038575935623655	0.6140214757230902	0.4713249252183643	T	T	T
0.4527316048469405	0.7932782171494626	0.4700543223469149	T	T	T
0.3837452435060257	0.5429282669049906	0.4658029543409227	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>3</sub>O@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -244.67939 eV.

2.48430000000000

2.9999999999999996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.4999999999999998	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495283

Ni C O H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444358	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2228334408072890	0.1116090949398225	0.2198077720669640	T	T	T
0.5563621911758601	0.1134018403003261	0.2207168808891638	T	T	T
0.8889516178118082	0.1108182449881797	0.2197249978888519	T	T	T
0.2229306159308209	0.4444081116600553	0.2197137054783574	T	T	T
0.5580828215146171	0.4445963157709688	0.2237181706345971	T	T	T
0.8861217234660115	0.4431029576408835	0.2214664193458657	T	T	T

0.5557124496075485	0.7761308105906518	0.2208046602494202	T	T	T
0.8858513766013764	0.7761403970690092	0.2220760998881348	T	T	T
0.2221257722781838	0.7777342821119814	0.2195343869543564	T	T	T
0.0044113557282862	0.0034228090008505	0.3287559692360321	T	T	T
0.3315396450043062	0.9975595025079327	0.3276678019978454	T	T	T
0.6677651914548666	0.0005700857263196	0.3268779907708723	T	T	T
0.3301643191148533	0.3343866602198330	0.3299922997619181	T	T	T
0.6685713415878488	0.3280860680949450	0.3377310641039667	T	T	T
0.0027224422546382	0.3324351917492864	0.3281157887776556	T	T	T
0.3293696862718283	0.6630109639114200	0.3292613170570158	T	T	T
0.6719149744668643	0.6741803234485489	0.3366500574638309	T	T	T
0.0045068462656779	0.6689715939337961	0.3282791872372811	T	T	T
0.6102282214989603	0.7953809366105020	0.4910355942117884	T	T	T
0.6014255792115043	0.6360173087558408	0.4461205200134569	T	T	T
0.5086647988557345	0.8517009038419305	0.4688177103059434	T	T	T
0.5564325113552400	0.7344391091206908	0.5467474231124820	T	T	T
0.7700508691118402	0.9277401017914092	0.4939622753705118	T	T	T
0.4345980987427258	0.5587768352434386	0.3941699387778558	T	T	T
0.6740746255473971	0.3176229461061051	0.4467772118182322	T	T	T
0.5590715821509912	0.1798283688447730	0.4671688289067499	T	T	T
0.6505124207802523	0.4387062865520972	0.4634067966772356	T	T	T
0.8132424706700635	0.3408913450351979	0.4659264599902972	T	T	T

CH<sub>2</sub>OH@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -241.20824 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H N H

36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F

0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2225086152165242	0.1108890296567853	0.2197855654523098	T	T	T
0.5569111435070850	0.1138269838533253	0.2211637183377507	T	T	T
0.8892219018595228	0.1110107715155343	0.2198077400906557	T	T	T
0.2235560743566475	0.4471070012587600	0.2216138032414373	T	T	T
0.5566960533707548	0.4437755975389913	0.2205545116798275	T	T	T
0.8864651306006014	0.4432314755915308	0.2210841860277902	T	T	T
0.5525942067111297	0.7766317116082011	0.2217437645972332	T	T	T
0.8896625324629526	0.7779311411167059	0.2196842226663398	T	T	T
0.2238819541931108	0.7753497620049611	0.2218282868946981	T	T	T
0.0014908463573572	0.0007285479254024	0.3291420391602721	T	T	T
0.3332451554517956	-0.0000889984385154	0.3279713902623692	T	T	T
0.6704279201090072	0.0037740668163361	0.3280580532632990	T	T	T
0.3333316213995341	0.3303980203776292	0.3277497859382275	T	T	T
0.6656249415747417	0.3361456273629855	0.3394000954464573	T	T	T
0.9975595868519318	0.3314732059926307	0.3281314183548990	T	T	T
0.3350576045400628	0.6665232019485068	0.3393485366573421	T	T	T
0.6716717234736445	0.6702799659683423	0.3275915554675958	T	T	T
0.9996981931939048	0.6670250290618878	0.3283803029993165	T	T	T
0.6420147462566997	0.3471955046478440	0.4454244896287184	T	T	T
0.4470548670996289	0.3159967893240422	0.4719651561104824	T	T	T
0.7605514426849009	0.4987667920916486	0.4665544756001626	T	T	T
0.3369464629750915	0.1869858169832804	0.4495689080004736	T	T	T
0.6713833751099710	0.2250827171267049	0.4661532327630949	T	T	T
0.3420705180594590	0.6475654247636917	0.4490704512963847	T	T	T
0.2002647636875761	0.6072725888782817	0.4709868290913911	T	T	T
0.4490314853106487	0.7871315386921132	0.4710690898740598	T	T	T
0.3804597146804355	0.5366771351784978	0.4639586551822342	T	T	T

CH<sub>3</sub>O@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -241.69181 eV.

2.48430000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H N H

36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2222441936307402	0.1111700810028216	0.2195206035356917	T	T	T
0.5565879449436598	0.1110238660576593	0.2203209587404258	T	T	T
0.8886946905446688	0.1110115965625251	0.2199739565126452	T	T	T
0.2207952413155618	0.4457806659509625	0.2231640801695435	T	T	T
0.5569696592724477	0.4426267423876979	0.2213175067744071	T	T	T
0.8887124448225300	0.4432001153469811	0.2203267238379787	T	T	T
0.5538601958523114	0.7787788567938601	0.2231949196253667	T	T	T
0.8881510114985168	0.7773384314038994	0.2195344182193484	T	T	T
0.2239013859292976	0.7756707674677701	0.2213406918989412	T	T	T
0.0023329109982444	0.9973867841081362	0.3282085268822872	T	T	T
0.3286020973228199	0.9994752308974516	0.3275543007423982	T	T	T
0.6652406144776498	0.9942095487760454	0.3315046460367938	T	T	T
0.3333483606209663	0.3303479596767927	0.3283825269241257	T	T	T
0.6625630005528864	0.3370049805915329	0.3328445940121443	T	T	T
0.0052609044507201	0.3343179378657522	0.3314859052850566	T	T	T
0.3333976452588781	0.6663106850624324	0.3391478397699520	T	T	T
0.6690676950250317	0.6661791375209747	0.3284470582267972	T	T	T
0.9999616041765769	0.6709338229784468	0.3275428845688845	T	T	T
0.7736073429108076	0.2265489461636727	0.4828290654967646	T	T	T
0.7770092227907206	0.2226355527480322	0.4049397655131790	T	T	T
0.8511604712227611	0.3881611702459950	0.5024628038067080	T	T	T
0.8538396502200970	0.1479537372818568	0.5051777920547014	T	T	T
0.6120234107686086	0.1478701498854860	0.5025451597388566	T	T	T
0.3319054284395838	0.6659646526444607	0.4503529580874037	T	T	T
0.4792916428089403	0.7573294438758356	0.4700094891151361	T	T	T
0.2769204331928293	0.5181036411075524	0.4693690164300278	T	T	T
0.2396645387671396	0.7209828064589602	0.4700067241262027	T	T	T

CH<sub>2</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>O@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -240.64788 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Ni C O H N H  
36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.2228227486710545	0.1102272959754128	0.2192574504670274	T T T
0.5548489150624938	0.1094264520538240	0.2198145175068359	T T T
0.8879202769864226	0.1105651150709884	0.2196869115121906	T T T
0.2230611102825489	0.4469238791485046	0.2215264536758352	T T T
0.5567750519352589	0.4461302569905982	0.2206143421973065	T T T
0.8894603163990513	0.4464457478731609	0.2206114435513719	T T T
0.5526629358115108	0.7751557749114476	0.2228726912750257	T T T
0.8896485645802075	0.7771110023408452	0.2203955077300813	T T T
0.2207247956647674	0.7740999066721648	0.2230319792225803	T T T
0.0018492315940723	0.0063252459617192	0.3279845471922135	T T T
0.3330056490833880	0.0003635971130976	0.3280489365780663	T T T
0.6708561739701560	0.0019515331689652	0.3301882708561694	T T T
0.3309793988599999	0.3282149881948464	0.3276424072969473	T T T
0.6637022850177888	0.3264828202929585	0.3281294729970137	T T T
0.9964476643549645	0.3314111117410107	0.3282243831049566	T T T
0.3277066778631722	0.6642561308185679	0.3392248994264170	T T T
0.6649151083717780	0.6615456403170648	0.3318461097617577	T T T
0.9929470166338812	0.6643673521127659	0.3370804068895016	T T T
0.9079649616971768	0.6799761569946147	0.4380564771651185	T T T
0.7452796637353973	0.7218896133801219	0.4404588021924852	T T T
0.0510180851950134	0.8068236839749667	0.4625454599978596	T T T
0.8594853712026457	0.5284827105260937	0.4637618268771329	T T T
0.7935884114634276	0.8863846104242502	0.3954069753651423	T T T
0.3366435218968195	0.6532520578610018	0.4492980655751367	T T T

0.3404921567066236 0.7802459018402520 0.4725506507795775 T T T  
0.4694079165626701 0.6515249597927977 0.4643845925436884 T T T  
0.2100971415712150 0.5231937544183698 0.4693839744907597 T T T

CH<sub>3</sub>O\_to\_CH<sub>2</sub>O@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -240.93934 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

Ni C O H N H  
36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333332728696163 0.3333332124058899 0.0000000000000000 F F F  
0.666666602029449 0.3333332124058899 0.0000000000000000 F F F  
0.999999395362806 0.3333332124058899 0.0000000000000000 F F F  
0.3333332124058899 0.6666664248117868 0.0000000000000000 F F F  
0.6666665457392256 0.6666664248117868 0.0000000000000000 F F F  
0.999998790725613 0.6666664248117868 0.0000000000000000 F F F  
0.1111113007303857 0.2222226014607713 0.1111113325119888 F F F  
0.4444446340637214 0.2222226014607713 0.1111113325119888 F F F  
0.7777779673970571 0.2222226014607713 0.1111113325119888 F F F  
0.4444445736000020 0.5555558138666683 0.1111113325119888 F F F  
0.7777779069333306 0.5555558138666683 0.1111113325119888 F F F  
0.1111112402666663 0.5555558138666683 0.1111113325119888 F F F  
0.4444445131362826 0.8888890262725582 0.1111113325119888 F F F  
0.7777778464696112 0.8888890262725582 0.1111113325119888 F F F  
0.1111111798029469 0.8888890262725582 0.1111113325119888 F F F  
0.2229625011130292 0.1139415507095263 0.2212239868807754 T T T  
0.5563126058546570 0.1097234587283593 0.2208461070024049 T T T  
0.8863031942495226 0.1092422928734926 0.2228202745396435 T T T  
0.2218977765276349 0.4427594809589935 0.2200079835424509 T T T  
0.5566013587910499 0.4448849862896685 0.2195733617352515 T T T  
0.8918462139208352 0.4431370302907473 0.2212837296950766 T T T  
0.5565470553534390 0.7791576058412535 0.2211408934875615 T T T  
0.8910673050612894 0.7822201009109550 0.2222250352593645 T T T  
0.2213838532066277 0.7768060199836492 0.2192959899109574 T T T  
0.9982875097315990 0.9979898109802193 0.3346948871104440 T T T  
0.3288316905297126 0.9944985107228630 0.3267027064784710 T T T  
0.6534543690328367 0.9934899032366863 0.3372967204796357 T T T  
0.3440256399141626 0.3368072643801241 0.3323549846589371 T T T  
0.6689053178788630 0.3341747105436811 0.3272104138895257 T T T  
0.9952527605830018 0.3329268194025167 0.3329250779297979 T T T

0.3283872811595356	0.6657840527164970	0.3270707683623630	T	T	T
0.6668643734280454	0.6648394678630445	0.3292180467721750	T	T	T
0.9988983752820552	0.6664092916299786	0.3292678851734389	T	T	T
0.2587857923226483	0.3076746853596621	0.4419942488855266	T	T	T
0.0539041116555215	0.1953084787449997	0.4197204277735924	T	T	T
0.3208447355971691	0.2104999176647265	0.4625025968646479	T	T	T
0.4216506642782216	0.4870702198387115	0.3983021099470168	T	T	T
0.2804630654128452	0.4263175341491878	0.4827656791811839	T	T	T
0.6419125400828359	0.9893719022387608	0.4476755539278104	T	T	T
0.5656504555881042	0.0608997143465006	0.4679516423836712	T	T	T
0.7958340071737436	0.0703425120679533	0.4634740739981431	T	T	T
0.5734909948789737	0.8423222240331592	0.4685281933214175	T	T	T

CH<sub>2</sub>O@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -237.63107 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495283

Ni C O H N H

36 1 1 2 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.9999999938488742	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.9999999876977554	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.777777314186096	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111111119389534	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.2249755472087140	0.1129711145986518	0.2233623909379278	T	T	T
0.5544747518705025	0.1105322070259609	0.2210450910277473	T	T	T
0.8875773346562524	0.1099550896842959	0.2197594326043153	T	T	T
0.2234670534511055	0.4435269486319691	0.2201281026188686	T	T	T
0.5523812667673476	0.4414443376433759	0.2225960541682314	T	T	T
0.8864717622433409	0.4438407592354609	0.2198607202541576	T	T	T



0.5556902323084086	0.7791250788470160	0.2203899577915676	T	T	T
0.8878833320631726	0.7774272572236376	0.2196034772976044	T	T	T
0.2220113013102646	0.7799791280053684	0.2207667786656595	T	T	T
0.9947966070344945	0.9958378572557536	0.3277547059465976	T	T	T
0.3250388132489651	0.9924293746601305	0.3357949698794845	T	T	T
0.6671853697765715	0.9992916183721360	0.3326885748601501	T	T	T
0.3288298491027728	0.3386032799717411	0.3381988199312494	T	T	T
0.6659463432160045	0.3288619829774400	0.3331317165966101	T	T	T
1.0002991955740870	0.3349157912784378	0.3258268142432833	T	T	T
0.3290900733308830	0.6640470088869473	0.3270021415860221	T	T	T
0.6667866269056720	0.6667886981744869	0.3282077990384532	T	T	T
0.9942533365396655	0.6633434333979408	0.3282353564470800	T	T	T
0.5912954358097512	0.1180568749335636	0.4215872886207017	T	T	T
0.3888740210242302	0.0131094516797113	0.4389410427504600	T	T	T
0.6817099161651312	0.2832526695961877	0.4417617824301579	T	T	T
0.6815011156249975	0.0362332769472367	0.4359640789102373	T	T	T
0.3135769924799841	0.3402569516309971	0.4479586605628449	T	T	T
0.4299954197669110	0.4732327072215128	0.4707303275646289	T	T	T
0.3280163430137085	0.2130964712993149	0.4629840620432976	T	T	T
0.1754872470271185	0.3208943283598348	0.4666383379142370	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -242.9563 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H N H

36 1 1 3 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F

0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2210556296630224	0.1098765421703968	0.2192275657483320	T	T	T
0.5566888266586003	0.1140709947712365	0.2212175557394061	T	T	T
0.8885422447000710	0.1110333283897560	0.2197039247211565	T	T	T
0.2233631279954590	0.4488015657124677	0.2211710340438897	T	T	T
0.5555122869447245	0.4450462364737517	0.2199875539967804	T	T	T
0.8883179452878868	0.4453399353146429	0.2204151093925823	T	T	T
0.5554235878304030	0.7763598418872637	0.2229108056955046	T	T	T
0.8880447143145533	0.7756032645261931	0.2211052557066970	T	T	T
0.2231433680908873	0.7758709442407234	0.2221351001510025	T	T	T
0.9978100690797862	0.0007035949705718	0.3281436329013295	T	T	T
0.3313370431689524	0.0027011009998218	0.3279609879328869	T	T	T
0.6681414030341249	0.0045764519461044	0.3280980061402226	T	T	T
0.3230794232595074	0.3266741891287981	0.3266558204525869	T	T	T
0.6625501379833632	0.3350779455115256	0.3341517275012478	T	T	T
0.9967586610429170	0.3291859475464812	0.3277875557247826	T	T	T
0.3332667782645448	0.6698433195790154	0.3385939182533725	T	T	T
0.6611947742540906	0.6633458253415586	0.3336221536260157	T	T	T
0.0046855598425071	0.6664126079450328	0.3340022219615063	T	T	T
0.9024907702454723	0.6064912225636235	0.4349144703591178	T	T	T
0.6881285779041699	0.5164805696286553	0.4162674212939968	T	T	T
0.9385256002166067	0.5017691992661093	0.4661221254632790	T	T	T
0.5823019603137326	0.4162573715511784	0.4535192453778844	T	T	T
0.9706902108503971	0.7614590004372978	0.4601543474474170	T	T	T
0.3630832057327850	0.6812862094634029	0.4491003493095615	T	T	T
0.3642623231265149	0.8100120654341554	0.4694406611343824	T	T	T
0.5012352048808448	0.6892492125037775	0.4616714816765077	T	T	T
0.2445082436116635	0.5523939219512050	0.4732729291688313	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -245.81829 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111072	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2235632619888321	0.1109044777132437	0.2204330534782548	T	T	T
0.5560376815612114	0.1139798524985687	0.2224631249204360	T	T	T
0.8889084967736196	0.1110956891761158	0.2188845107483585	T	T	T
0.2227671305060456	0.4453443585941187	0.2199224853939386	T	T	T
0.5563738905623918	0.4425725096732563	0.2221104646745352	T	T	T
0.8868028862770729	0.4446895554214765	0.2229730402750386	T	T	T
0.5534502400140178	0.7766836585407024	0.2203938428584796	T	T	T
0.8896728300529501	0.7770800341872244	0.2200249396815694	T	T	T
0.2233273783277474	0.7777122305361299	0.2203555807341189	T	T	T
0.9978631479132773	0.0024079083676196	0.3282233058309643	T	T	T
0.3311080220369202	0.9985457190616313	0.3319045971647668	T	T	T
0.6719716937741935	0.0018330092330412	0.3274782858253595	T	T	T
0.3297213679293637	0.3326882469845319	0.3299206520344396	T	T	T
0.6656620790663492	0.3336354068184711	0.3392701721712474	T	T	T
0.9989660370770539	0.3278567902151337	0.3282742369820057	T	T	T
0.3360296662026364	0.6664804877807832	0.3340389530623742	T	T	T
0.6707511216935899	0.6705962297450585	0.3276167905954621	T	T	T
0.0018458369254164	0.6719814792423451	0.3317934945844369	T	T	T
0.2094815737804754	0.7737610998429079	0.4227428536076800	T	T	T
0.2907280083438561	0.6471437044803384	0.4439233049475241	T	T	T
0.2937542812718337	0.9345495173824426	0.4445511668613419	T	T	T
0.0407059551286733	0.7050717622363115	0.4365461391089329	T	T	T
0.4439861097433240	0.7307646872347692	0.4592873343184590	T	T	T
0.2439684611121525	0.4716555365403220	0.3952795092684908	T	T	T
0.6606442114469038	0.3318345542186804	0.4511261546483596	T	T	T
0.7575124495013884	0.4754218933976170	0.4728658857937652	T	T	T
0.7060686621421062	0.2317759865642874	0.4707985993639234	T	T	T
0.5137177004514852	0.2853891344166832	0.4694941170935155	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>NH@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -246.21337 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.11111111111111072	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.2194884503291722	0.1099770092055827	0.2221568676947450	T T T
0.5546238232898895	0.1116406543347697	0.2192990291230735	T T T
0.8913758425482119	0.1094402350037999	0.2211610898023117	T T T
0.2244463260802878	0.4439498935895616	0.2217082355349663	T T T
0.5557609768605403	0.4455045859155382	0.2202758516447149	T T T
0.8885092795241671	0.4440107614828238	0.2197033048925703	T T T
0.5548755413364952	0.7771785482508037	0.2199560715210211	T T T
0.8880990160815739	0.7778986099631409	0.2225295716070112	T T T
0.2238728491448537	0.7762326245596154	0.2216831475855344	T T T
0.9973063711229597	0.9963232222077540	0.3378159900747353	T T T
0.3357917828254968	-0.0006544977524329	0.3288980299925149	T T T
0.6690331068281985	0.0081480617248418	0.3266862400840702	T T T
0.3300741977038018	0.3270180697722609	0.3336777401541169	T T T
0.6680649626469818	0.3319747622019731	0.3292906857207671	T T T
0.9959319404443043	0.3339532111498116	0.3277893760154807	T T T
0.3350738148985330	0.6701082126066066	0.3353239546678224	T T T
0.6665786498338522	0.6717821920211320	0.3318559280457335	T T T
0.0003241710172800	0.6627368098946829	0.3279671843843415	T T T
0.3949667783328389	0.4266118251043975	0.4414737657172699	T T T
0.4874049177406370	0.6362702173091291	0.4147447319112375	T T T
0.5319272270446853	0.7463715276230596	0.4550730030522399	T T T
0.2366952891049198	0.3635479113853539	0.4629543422497673	T T T
0.4925755610236068	0.4064799569384643	0.4824440148950152	T T T
0.4391594059507438	0.2769750404118020	0.3962161114319506	T T T
0.9855479548164092	0.9658121471400508	0.4490492074410580	T T T

0.9409498576768742 0.0606779952755048 0.4738991270654381 T T T  
0.8786909490662766 0.8145622487807520 0.4607371706396012 T T T  
0.1259906086878622 0.9969066767316278 0.4698152568606615 T T T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -246.75445 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2233257416472662 0.1130773345425112 0.2206691116404651 T T T  
0.5573843769247329 0.1134186745373269 0.2203206687355189 T T T  
0.8887195630894728 0.1112502383622885 0.2195593761069108 T T T  
0.2221231464199592 0.4422205453684130 0.2213704124042736 T T T  
0.5546678364733543 0.4424232484199170 0.2219609963679034 T T T  
0.8866306016908370 0.4455991153678553 0.2237656993153006 T T T  
0.5556654442112042 0.7774659021143274 0.2196823527743480 T T T  
0.8909862746662842 0.7758356184150617 0.2212822755232806 T T T  
0.2197023178326459 0.7758244530816538 0.2206598845131480 T T T  
0.9972992222179484 0.0007026976997861 0.3277514101532272 T T T  
0.3350158699848276 0.9973904169288290 0.3261558726774075 T T T  
0.6676251501525700 0.9993930744841748 0.3290709396683306 T T T  
0.3303496723925091 0.3343930844971268 0.3360617170273182 T T T  
0.6597455255538853 0.3280593381381237 0.3386623415297704 T T T  
0.9971360495191169 0.3298763103281890 0.3284803687437958 T T T

0.3368765527514590	0.6678785738456290	0.3274520888196923	T	T	T
0.6691073610383032	0.6718653908775307	0.3275635260622466	T	T	T
0.0030629281735403	0.6685538153894868	0.3382902892511879	T	T	T
0.5477674446274884	0.2814199753982368	0.4384868068890780	T	T	T
0.3824754385430207	0.3351534083400958	0.4424749042428701	T	T	T
0.4852847979391886	0.1201054887086125	0.4564984807409247	T	T	T
0.4345487035020199	0.4825902216278153	0.4611964700428454	T	T	T
0.6770223177213560	0.3820039784280952	0.4750232149779077	T	T	T
0.2542945754046039	0.2326800082143642	0.4715375578744043	T	T	T
0.0367987780838284	0.6883563927351780	0.4491891135072123	T	T	T
0.1898383105444998	0.7837649749729899	0.4621402098617526	T	T	T
0.9902592905492914	0.5446009257983786	0.4707150825811957	T	T	T
0.9508376455415992	0.7468024223159062	0.4719283548346762	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -247.06223 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H N H

36 1 1 4 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2236472857248498	0.1152639210655461	0.2221486376160053	T	T	T
0.5546632349474325	0.1096751783561334	0.2195252372375622	T	T	T
0.8902084055184871	0.1135058298303261	0.2215805903486459	T	T	T
0.2198591813402432	0.4413476930008448	0.2222643049364918	T	T	T
0.5549648712628279	0.4449239842011942	0.2208407044992954	T	T	T

0.8913049433932000	0.4437769481416615	0.2210857016852955	T	T	T
0.5561086213613480	0.7757303261547520	0.2200900765909983	T	T	T
0.8850603250754027	0.7766695272095318	0.2216174050249062	T	T	T
0.2213173787677376	0.7785645471814781	0.2189787500375074	T	T	T
0.0004707526312076	0.9972003920311041	0.3286092577428320	T	T	T
0.3331044883211491	0.9985967441471318	0.3291274659346229	T	T	T
0.6635446664847632	0.9955901558062066	0.3277997988953570	T	T	T
0.3389338083433537	0.3340742688556040	0.3363682801852443	T	T	T
0.6690059775203980	0.3271978815127364	0.3262320137478988	T	T	T
0.9980012058544457	0.3306378501839259	0.3382854538441401	T	T	T
0.3298705887839635	0.6724963978196992	0.3257759012773399	T	T	T
0.6688701378186516	0.6636891796764677	0.3365411832696029	T	T	T
0.0024751921937843	0.6693286366737565	0.3280974687119819	T	T	T
0.5723291124987915	0.4366730507474746	0.4800350299251696	T	T	T
0.4954004551557625	0.5091796950322165	0.4192292587602067	T	T	T
0.4389784514001287	0.5988526250137504	0.4406797900429764	T	T	T
0.4519808590109774	0.3570969446539538	0.5224080672669246	T	T	T
0.7095524801772427	0.5659731730949685	0.5063050742231684	T	T	T
0.6145611985877675	0.3241330388673471	0.4589888033343612	T	T	T
0.9938661094656269	0.3185058707556193	0.4491772080040039	T	T	T
0.1186025738137937	0.3057103966550582	0.4656612433375328	T	T	T
0.8611348790398281	0.1915103090944674	0.4674960509725016	T	T	T
0.0036477807325747	0.4491408666946685	0.4716433292981100	T	T	T

CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -249.87961 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H N H

36 1 1 5 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F

0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.11111111111111072	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2245215099013184	0.1133180351822789	0.2205122019368857	T	T	T
0.5593096677966815	0.1131041417646156	0.2245568851607143	T	T	T
0.8861581361584406	0.1094825198834728	0.2213985135843403	T	T	T
0.2229424072108747	0.4427938264039279	0.2208151597554820	T	T	T
0.5541784671029863	0.4425025452926962	0.2207513506006233	T	T	T
0.8860182757809798	0.4431269370223322	0.2213914288694120	T	T	T
0.5557561102481995	0.7799171773084816	0.2210540815338080	T	T	T
0.8899343794827783	0.7776380425084827	0.2190525307671719	T	T	T
0.2212729375909885	0.7772729340808192	0.2196362706932384	T	T	T
0.0030516093227485	0.9986539235206078	0.3272749151682668	T	T	T
0.3285454063926465	0.9928895498913244	0.3279279755607785	T	T	T
0.6674365275752718	0.9963103127552000	0.3387292975176431	T	T	T
0.3287373010569529	0.3326631629385178	0.3344190860823213	T	T	T
0.6647437293868541	0.3343675780840097	0.3379903972776607	T	T	T
0.0001596277269214	0.3337434404823617	0.3278360046636362	T	T	T
0.3290317895480265	0.6661273182242777	0.3278061459723161	T	T	T
0.6714204411234187	0.6711380162866726	0.3258849859721292	T	T	T
0.0001067870571513	0.6675349772316693	0.3307905457563848	T	T	T
0.5938905281604848	0.3648720929812492	0.4483135551916815	T	T	T
0.3864776212068678	0.3404150339148193	0.4428608039849246	T	T	T
0.5812525181532177	0.2150859303288285	0.4597627851699123	T	T	T
0.6889662244725175	0.4759589859217428	0.4910589519924665	T	T	T
0.3749220476703086	0.4584965903767290	0.4666918674540448	T	T	T
0.2746021963352276	0.2013087928606324	0.4637123684370493	T	T	T
0.7371115951087135	0.5204586401520509	0.3937427543980637	T	T	T
0.6951640687364692	0.9694824481875692	0.4500808242318681	T	T	T
0.7946351019353720	0.1086576860714273	0.4743265283530016	T	T	T
0.7579506494568640	0.8747188466047748	0.4551147442356318	T	T	T
0.5547853147355644	0.9022403043083013	0.4764373505975983	T	T	T

CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -249.93251 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H N H  
36 1 1 5 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F



0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
-0.0000000000000002 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111142 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777788 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777788 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.11111111111111058 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2226792162522144 0.1132003800405532 0.2204449282122273 T T T  
0.5553801427481170 0.1114921449608848 0.2196902874700122 T T T  
0.8897451388568425 0.1115623345954517 0.2197926217328136 T T T  
0.2253458423382270 0.4460973683224630 0.2237259421732037 T T T  
0.5515469234282799 0.4428443082265707 0.2221096653366585 T T T  
0.8890696243893943 0.4446781235965737 0.2194855098179826 T T T  
0.5524335517153471 0.7768742307472863 0.2211961644819077 T T T  
0.8883112793271171 0.7780821401543457 0.2195368278431648 T T T  
0.2221397942642907 0.7759942039817183 0.2204644346289560 T T T  
0.9984968820987895 -0.0024834932655606 0.3291946932602320 T T T  
0.3330034393413588 0.0003261907890664 0.3273525793940786 T T T  
0.6705958697456426 0.0046220109021929 0.3280495042521975 T T T  
0.3334214808378445 0.3333477501643456 0.3392405523240143 T T T  
0.6701208037209208 0.3347162062414069 0.3281963096838241 T T T  
0.9954737379646862 0.3330876557663999 0.3279004491313721 T T T  
0.3341232186548476 0.6743586712384607 0.3364275655581073 T T T  
0.6704102057267661 0.6707799239849116 0.3280345701135651 T T T  
0.9956102612460646 0.6656757015653934 0.3277487347510267 T T T  
0.4681248772028067 0.2844992157358280 0.4915840590769232 T T T  
0.3028506959527417 0.2825657961775784 0.4476718822512369 T T T  
0.5182873187941343 0.1778433715093228 0.4696347810528903 T T T  
0.4187872762856896 0.2416394937042729 0.5488841003149384 T T T  
0.1600952070200850 0.1903237530843526 0.4705431789424318 T T T  
0.2418183691821089 0.1137859945930673 0.3905640191911195 T T T  
0.6060818740751427 0.4405726342703049 0.4905142574921764 T T T  
0.3325145601642162 0.6785901103947143 0.4454631356722225 T T T  
0.3216899538438984 0.5361107337603379 0.4584340529670520 T T T  
0.2074086007106053 0.6844187747910414 0.4656872197078822 T T T  
0.4646454566946803 0.7996271203772188 0.4668797909714251 T T T

CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>@Ni-NH<sub>3</sub>. Energy = -250.95632 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H N H

36 1 1 5 1 3

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2234744794335375 0.1135158168651900 0.2217672973524747 T T T  
0.5557981326524754 0.1108361951827015 0.2197865937398208 T T T  
0.8884063779750750 0.1107096602880765 0.2197090287460888 T T T  
0.2233244279856335 0.4430584213170934 0.2215379137557590 T T T  
0.5524215562336217 0.4426708057290049 0.2219864495315066 T T T  
0.8902292448815960 0.4474794926784517 0.2211225028771177 T T T  
0.5558858353796330 0.7780363756058886 0.2197697776289224 T T T  
0.8900313027216546 0.7759347805801210 0.2212124824719064 T T T  
0.2190091889737865 0.7761203541232353 0.2211554025842815 T T T  
0.9966040277081617 -0.0001253184471616 0.3276905149382743 T T T  
0.3369675751642356 0.0003443303988856 0.3278180658120385 T T T  
0.6668030756185750 0.9994733621253987 0.3302574128612373 T T T  
0.3339900413105168 0.3326320140857947 0.3390989718104883 T T T  
0.6661477307174249 0.3298597757055601 0.3279423821898121 T T T  
0.9963018434044940 0.3296369675680771 0.3274537062674772 T T T  
0.3368473980698363 0.6695988238161334 0.3276430706849614 T T T  
0.6657870683656317 0.6687185203753484 0.3281464981061504 T T T  
0.0005690021855917 0.6666968952023042 0.3376201822024829 T T T  
0.4177233479805521 0.2714237354781350 0.5004155848464450 T T T

0.3040242159370703	0.3347249307743275	0.4504674914106208	T	T	T
0.3975238693826750	0.1221184021146541	0.4819506934359412	T	T	T
0.3671050854763396	0.2605393585868527	0.5578027822454716	T	T	T
0.3387025217996001	0.4839248913583188	0.4611148895190768	T	T	T
0.1465847751073885	0.2417204228134087	0.4566532843527438	T	T	T
0.5835460955232009	0.3849664792685566	0.4964578957542933	T	T	T
0.0006541267196080	0.6698015640109413	0.4487084112256809	T	T	T
0.1496424339413598	0.7547134049541748	0.4676849495797449	T	T	T
0.9356084746550527	0.5211454752301211	0.4681133881484855	T	T	T
0.9162446429146990	0.7354199108972289	0.4668150721988938	T	T	T

MeOH@Pd-MeOH. Energy = -248.,21179 eV.

2.786000000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 2 8

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1113440230046713	0.8892969403486832	0.1100653399619638	T	T	T
0.2230389300100289	0.1130304517050379	0.2199274170359991	T	T	T
0.5559666553558463	0.1116449800617325	0.2193220712581631	T	T	T
0.8888189761626105	0.1125955191029868	0.2196695874447049	T	T	T
0.2238434737256679	0.4445300454135251	0.2212931429443616	T	T	T
0.5539260479394311	0.4451052044862274	0.2206974046145172	T	T	T
0.8897866273036152	0.4457384936673385	0.2194252044452943	T	T	T
0.5559654853197270	0.7793142029026704	0.2200069623637593	T	T	T
0.8891903625314380	0.7782553245288960	0.2191472756079132	T	T	T

0.2219698988093069	0.7780521311889446	0.2192930335694020	T	T	T
0.9980095204348035	1.0002286655851913	0.3282482689081239	T	T	T
0.3342992072304247	1.0004430447842443	0.3284345080924081	T	T	T
0.6672698167465423	0.0028534853808314	0.3300919237392628	T	T	T
0.3331901115749122	0.3354154270911160	0.3338612043568298	T	T	T
0.6689993752775955	0.3359117479106775	0.3283087334718908	T	T	T
0.9989545019405943	0.3363598994193605	0.3299097079315339	T	T	T
0.3340138706587564	0.6704927954073001	0.3299345551937093	T	T	T
0.6685234974169790	0.6701242067927616	0.3297384486750001	T	T	T
1.0002986412397938	0.6688853857664353	0.3302167708385076	T	T	T
0.6675973930469274	0.2320127560878936	0.5070846668998348	T	T	T
0.1946219506595155	0.1304259932321802	0.4685497760892702	T	T	T
0.6584411792466901	0.3855083160354736	0.4792421644953665	T	T	T
0.3236874684318603	0.3078007664815035	0.4415672606277706	T	T	T
0.7311324594950340	0.4228512020059929	0.4380969055604894	T	T	T
0.5802184982035113	0.1898147240812478	0.5508930015328276	T	T	T
0.4522280150231185	0.3394042034383645	0.4558796230078982	T	T	T
0.8102905639440775	0.2741400141103865	0.5213218043066230	T	T	T
0.6161265035444112	0.1151395093158135	0.4726060618844897	T	T	T
0.2000496534023423	0.1383249650992776	0.5223186261414752	T	T	T
0.0555270914070954	0.0951611875319753	0.4518412107605166	T	T	T
0.2236532811382421	0.0218253015031912	0.4516773687466651	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>OH@Pd-MeOH. Energy = -247.43346 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 2 8

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F

0.1111111111111072	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.8888888888888999	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888999	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111214	0.8888888888888999	0.1111111111111072	F	F	F
0.2214935987702485	0.1120327862292468	0.2188753473011129	T	T	T
0.5542770498254705	0.1119400660818794	0.2193212495000236	T	T	T
0.8880314059835928	0.1122610687772138	0.2192725674750268	T	T	T
0.2204528076290637	0.4447058847066418	0.2196410095215694	T	T	T
0.5564416408127635	0.4453038585539228	0.2218339104824984	T	T	T
0.8855647714326031	0.4439728000509807	0.2213651973588958	T	T	T
0.5548615157723511	0.7748312893693117	0.2212212819406101	T	T	T
0.8887934645191968	0.7787185237188138	0.2204687630048769	T	T	T
0.2195045595512176	0.7763694623654492	0.2196496451155233	T	T	T
0.0014140588133504	0.0060291796280381	0.3289897197612363	T	T	T
0.3272582158233808	0.9984947540708429	0.3282497007800346	T	T	T
0.6639281487684597	0.0014656298133172	0.3278668538240521	T	T	T
0.3291474853637789	0.3348907230388243	0.3291691328340687	T	T	T
0.6624408953615835	0.3285907771876819	0.3336353097730969	T	T	T
0.9991907165925442	0.3348329356198848	0.3299287714685321	T	T	T
0.3282698969354533	0.6670221027019207	0.3303892361713741	T	T	T
0.6664116942495718	0.6737565530399384	0.3339879333809896	T	T	T
0.9978826936934552	0.6683438947685425	0.3322952098300465	T	T	T
0.6953693812224145	0.6937299828796897	0.4420389774593000	T	T	T
0.4926992445148438	0.0970240554875760	0.4692615214466233	T	T	T
0.5376166320628002	0.5382188452518801	0.4670834351317608	T	T	T
0.6281756805964761	0.2766218414162516	0.4461505747126960	T	T	T
0.4335415730823011	0.5106963806857181	0.4370303079039006	T	T	T
0.6831563137071153	0.8186809354138478	0.4389923861555095	T	T	T
0.5858486971170643	0.3648796525066055	0.4585741229123088	T	T	T
0.8126850853111595	0.7210031595050770	0.4734473248026848	T	T	T
0.8036007959310045	0.6569913049483654	0.3910870732265468	T	T	T
0.4855943502395876	0.0961191335339229	0.5230473134736308	T	T	T
0.3542313576575306	0.0537755798479660	0.4485789078873145	T	T	T
0.5350662502439166	0.9985465082756840	0.4527878642997710	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>3</sub>O@Pd-MeOH. Energy = -247.39095 eV.

2.78600000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495283

Pd C O H

36 2 2 8

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F

0.666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F  
0.333333333333357 0.333333333333357 0.000000000000000 F F F  
0.666666666666643 0.333333333333357 0.000000000000000 F F F  
0.000000000000000 0.333333333333357 0.000000000000000 F F F  
0.333333333333357 0.666666666666643 0.000000000000000 F F F  
0.666666666666643 0.666666666666643 0.000000000000000 F F F  
0.000000000000000 0.666666666666643 0.000000000000000 F F F  
0.111111111111143 0.222222222222214 0.111111111111101 F F F  
0.4444444444444358 0.222222222222214 0.111111111111101 F F F  
0.777777777777786 0.222222222222214 0.111111111111101 F F F  
0.444444444444429 0.555555555555571 0.111111111111101 F F F  
0.777777777777786 0.555555555555571 0.111111111111101 F F F  
0.111111111111143 0.555555555555571 0.111111111111101 F F F  
0.444444444444429 0.888888888888857 0.111111111111101 F F F  
0.777777777777786 0.888888888888857 0.111111111111101 F F F  
0.111111111111143 0.888888888888857 0.111111111111101 F F F  
0.2257464499814867 0.1122050904235000 0.2192033005466451 T T T  
0.5601972763810245 0.1136725188509995 0.2199040711805345 T T T  
0.8934429648350122 0.1127266691806847 0.2196989321656153 T T T  
0.2253680578896798 0.4459517748941210 0.2195814269512086 T T T  
0.5596909290994210 0.4454004664589122 0.2204599253572209 T T T  
0.8905066978619273 0.4446022175869783 0.2211377236155835 T T T  
0.5589828320364277 0.7786608313865024 0.2199828302501254 T T T  
0.8905338845928614 0.7782067273308866 0.2214280495491215 T T T  
0.2256261427447183 0.7784157071508245 0.2192669767050308 T T T  
0.0117844497442803 0.0059901343596232 0.3300889890002884 T T T  
0.3404278313421761 0.0007874618157597 0.3284559404991114 T T T  
0.6752105182091233 0.0026029018868278 0.3288723101735867 T T T  
0.3383221193713966 0.3372707733494947 0.3292423435515165 T T T  
0.6767116121303802 0.3344075356025869 0.3326571779567720 T T T  
0.0079638445100315 0.3354986588768450 0.3299420301391267 T T T  
0.3407239674670391 0.6671296395663916 0.3312760784474345 T T T  
0.6849843686324858 0.6758998123421528 0.3315024761787930 T T T  
0.0134060987344412 0.6715122057645821 0.3299926277504313 T T T  
0.6239989018057980 0.7534597398228088 0.4758883006511378 T T T  
0.4923950810142049 0.1818040105279810 0.4685245956701636 T T T  
0.6478011168123607 0.3390354344595856 0.4394254963678174 T T T  
0.5862368168176020 0.6064692596456543 0.4320882551781377 T T T  
0.5827531785535318 0.8479959617153059 0.4537145581039951 T T T  
0.6273354781241256 0.4502674236108342 0.4431560860404485 T T T  
0.5448204465551985 0.6961950943145833 0.5213918478377602 T T T  
0.7727969800335078 0.8331058494332956 0.4870151197631929 T T T  
0.4327069178338311 0.5599191625102750 0.3842020586184839 T T T  
0.4968495142783489 0.1989417952115750 0.5219977929137835 T T T  
0.3606088533570776 0.1636450507407243 0.4493199889557170 T T T  
0.5017979348180347 0.0587974115733358 0.4563057052156349 T T T

CH<sub>2</sub>OH@Pd-MeOH. Energy = -244.25096 eV.

2.78600000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 2 7

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2240838914081945	0.1121970626303655	0.2204169626712985	T	T	T
0.5570626124209688	0.1105680860479834	0.2198423839489483	T	T	T
0.8895800490549611	0.1096389598314396	0.2191829056489289	T	T	T
0.2239534553914053	0.4442403326379154	0.2193677681496355	T	T	T
0.5536327613911524	0.4427351377055767	0.2211479933303511	T	T	T
0.8893304989322703	0.4458158580278949	0.2202424112690289	T	T	T
0.5578452481779123	0.7779705221295541	0.2195146704171981	T	T	T
0.8905551344029811	0.7756299024850336	0.2211520565710706	T	T	T
0.2215364875658998	0.7771729634581195	0.2206591528474307	T	T	T
0.0002485787974643	0.9961783632481158	0.3291559854647896	T	T	T
0.3363284003126277	0.9991009014734479	0.3295245718489671	T	T	T
0.6693307264252445	0.9995802018790899	0.3302307068282032	T	T	T
0.3362686221865157	0.3344976053542823	0.3332027122471045	T	T	T
0.6682728509767637	0.3313620510516938	0.3299890323494477	T	T	T
0.0000819636799129	0.3312385146428616	0.3270812503899105	T	T	T
0.3381860319243932	0.6689995509410622	0.3281723252957213	T	T	T
0.6706807420789209	0.6671268805486870	0.3301332631329206	T	T	T
0.0044258793994703	0.6635836707114984	0.3374292759931582	T	T	T

0.0146587702785224	0.6301173101789981	0.4357775123460829	T	T	T
0.1706286876581921	0.1563423440832637	0.4738728597460432	T	T	T
0.2712303828595152	0.3363621130616167	0.4443091085462835	T	T	T
0.9993578752296800	0.4599031574595783	0.4540252909188973	T	T	T
0.8970666033883986	0.6426845730207902	0.4535520459230035	T	T	T
0.1917867778232954	0.3928044332285718	0.4458121819966945	T	T	T
0.8773965431641018	0.3602330376851254	0.4390916523051800	T	T	T
0.1488107949619087	0.7407931216039086	0.4531722569458760	T	T	T
0.1453960935002841	0.1689423406378059	0.5259244656642197	T	T	T
0.0374317829474602	0.0691592408643902	0.4484292290493790	T	T	T
0.2563000041217572	0.0916673104968111	0.4686929919045320	T	T	T

CH<sub>3</sub>O@Pd-MeOH. Energy = -243.73317 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 2 7

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2227782943313304	0.1138745644093937	0.2193926033337452	T	T	T
0.5556795943137933	0.1133999590788547	0.2189556386247515	T	T	T
0.8890385580169361	0.1132691811350369	0.2189181710276550	T	T	T
0.2205827454557757	0.4450430033161778	0.2213481911368516	T	T	T
0.5558816552388725	0.4453765684947052	0.2213884836959043	T	T	T
0.8886618323367399	0.4463050321757261	0.2201314591309383	T	T	T
0.5559302990635606	0.7810056546700169	0.2210339812114666	T	T	T



0.8886312309588420	0.7784680609762686	0.2197833909778100	T	T	T
0.2207785958296689	0.7783024299702792	0.2199785244798461	T	T	T
1.0004018587145365	0.0028119119969637	0.3282047822717361	T	T	T
0.3322576920188410	0.0029044535269669	0.3284063229066295	T	T	T
0.6604508260361837	0.9919437880470598	0.3285865579613885	T	T	T
0.3329697334096209	0.3358874856345057	0.3313397834767338	T	T	T
0.6587607696580244	0.3399355350040872	0.3302713768527657	T	T	T
0.0105714015597688	0.3396512449578520	0.3301481529379529	T	T	T
0.3337179757094175	0.6685763252992090	0.3303580376994862	T	T	T
0.6645428586456017	0.6686768864538416	0.3303557234764071	T	T	T
0.0011464352159405	0.6728839747557843	0.3309047950867198	T	T	T
0.7563114874979668	0.1717560849949833	0.4651084873504219	T	T	T
0.1193782147767736	0.6561919048832069	0.4817764565235317	T	T	T
0.7744467236553887	0.2165105319143043	0.3972860313460460	T	T	T
0.9734450896891513	0.6609940815017382	0.4458406152675927	T	T	T
0.8333270014397358	0.2985274507065379	0.4946276511176424	T	T	T
0.8128648870015579	0.0802759691790097	0.4752781383703998	T	T	T
0.6094094630349201	0.1017212120774908	0.4791406023153599	T	T	T
0.8625615615694182	0.5385838801208113	0.4468833640335031	T	T	T
1.0844033734649807	0.6329950193686469	0.5341071848726104	T	T	T
0.1472800378147683	0.5494691173013849	0.4623862845405274	T	T	T
0.2431520339610245	0.7918907998349191	0.4748331379980340	T	T	T

CH<sub>2</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>O@Pd-MeOH. Energy = -243.57694 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 2 7

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F

0.11111111111110930	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.11111111111110930	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2240594380776725	0.1123516788344766	0.2194771693452902	T	T	T
0.5570347613250031	0.1128449352285566	0.2197830568325797	T	T	T
0.890422222392646	0.1114453095027587	0.2193810055951164	T	T	T
0.2230160897555445	0.4447955992497643	0.2199431381906330	T	T	T
0.5582444977123409	0.4464652074161968	0.2214905075203056	T	T	T
0.8870622174532405	0.4434997106305526	0.2214254666652451	T	T	T
0.5561806680168402	0.7764263412566130	0.2205479554312117	T	T	T
0.8909514496803906	0.7787147777853851	0.2203224800865964	T	T	T
0.2233246912853203	0.7769887986771374	0.2195518751046417	T	T	T
0.0045749448674184	0.0023566121998004	0.3294787442684990	T	T	T
0.3335955146655892	0.9979883500135921	0.3284602000233990	T	T	T
0.6692435826524330	0.0005965471039384	0.3280690406928443	T	T	T
0.3340531325568900	0.3366775015465743	0.3304712662016295	T	T	T
0.6702564719454724	0.3328309199011620	0.3333209539879358	T	T	T
0.0023110748515340	0.3331942287086850	0.3299682525807662	T	T	T
0.3340763149692769	0.6638655203368232	0.3321874363682679	T	T	T
0.6778545832873757	0.6750793240686909	0.3345605733913144	T	T	T
0.0052003017224478	0.6687300208842458	0.3300975846948835	T	T	T
0.6515039200580324	0.6918958466806067	0.4358839892748035	T	T	T
0.5039348915817223	0.1299904828739127	0.4682921204265578	T	T	T
0.4922645618819728	0.5373517648410854	0.4484410639530473	T	T	T
0.6196482548787376	0.3097346596657912	0.4407840589520335	T	T	T
0.5565876990690498	0.3859905377483587	0.4471469898045282	T	T	T
0.6491536781808208	0.8228279620822926	0.4386418380138878	T	T	T
0.3774425557347206	0.5199009438615871	0.3918008764014943	T	T	T
0.7756165141076680	0.6965835777475513	0.4566153407513517	T	T	T
0.4884123147599385	0.1421096797664173	0.5212218130010986	T	T	T
0.3652520895168883	0.0598982251439398	0.4450109641837772	T	T	T
0.5705611471712513	0.0473201296249350	0.4595174325453197	T	T	T

CH<sub>3</sub>O\_to\_CH<sub>2</sub>O@Pd-MeOH. Energy = -243.52698 eV.

2.786000000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 2 7

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F

0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111110930	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111110930	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2210380326320735	0.1115523448376513	0.2196143665627276	T	T	T
0.5548214447188664	0.1103980895390013	0.2196273688213874	T	T	T
0.8870958425960541	0.1102404468265147	0.2200998161076066	T	T	T
0.2225637943202629	0.4422879639353903	0.2213602390188102	T	T	T
0.5536985511951622	0.4430053559981581	0.2211731331164088	T	T	T
0.8866805143557386	0.4422785593879633	0.2200740581930307	T	T	T
0.5557350982621045	0.7807751687864004	0.2216045890331287	T	T	T
0.8868896495238282	0.7758338747116221	0.2190721108769570	T	T	T
0.2201566118726630	0.7748136429249433	0.2187484780361496	T	T	T
0.9959191692596295	0.9951540601829865	0.3284085620496527	T	T	T
0.3265890483733498	0.9934338252017986	0.3266135856333924	T	T	T
0.6637296267912565	0.9981090684289006	0.3342239221681977	T	T	T
0.3281968163015105	0.3309014995857201	0.3338705867645546	T	T	T
0.6654014020319944	0.3338655888797343	0.3309176259143818	T	T	T
0.9992928674111244	0.3314448778669657	0.3310593885069409	T	T	T
0.3290941109206892	0.6648456568969568	0.3302376130828496	T	T	T
0.6640847425829259	0.6653105707479600	0.3296574136411511	T	T	T
0.9980319056955271	0.6657973431670640	0.3289042155747117	T	T	T
0.6926007291729201	0.1381183898891441	0.4404276767114914	T	T	T
0.2077969209658868	0.1361410268435400	0.4734283997969367	T	T	T
0.6596125672253588	0.2769445785094655	0.4323170047701171	T	T	T
0.3543083330010136	0.2953872166010957	0.4415455378869274	T	T	T
0.5724989165497113	0.9967454497292647	0.4457701995804385	T	T	T
0.4682840742292259	0.2828264001588690	0.4424978961662667	T	T	T
0.8054974129433130	0.1659116704907693	0.4749217182842038	T	T	T
0.8253479511464153	0.1503308324893817	0.3894167897027233	T	T	T
0.2400655728611144	0.1384672067341276	0.5257263720610318	T	T	T
0.0808457562630410	0.1430289478965835	0.4677570098055565	T	T	T
0.1862778820244297	0.0065146981795499	0.4509643514681134	T	T	T

CH<sub>2</sub>O@Pd-MeOH. Energy = -240.33075 eV.

2.78600000000000  
3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000  
-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000  
0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H  
36 2 2 6

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2243517276909323	0.1095190705870171	0.2198356108804744	T	T	T
0.5577719753403907	0.1086257408427910	0.2193718070345367	T	T	T
0.8912217554877085	0.1112630910843734	0.2212090301921198	T	T	T
0.2244555968197445	0.4417714007962144	0.2199969003971019	T	T	T
0.5558624754218076	0.4413016121480654	0.2202905032614805	T	T	T
0.8909399441329975	0.4430716587829309	0.2196344188315850	T	T	T
0.5548644633158706	0.7747010930120237	0.2213655282305184	T	T	T
0.8902951327892935	0.7749465394518088	0.2198327618098365	T	T	T
0.2228418784108937	0.7746588599260650	0.2196959693709330	T	T	T
0.0026644103055126	0.9912056449172791	0.3292873692270793	T	T	T
0.3390015493410990	0.9930934540152124	0.3282608994363158	T	T	T
0.6711502588955170	0.9943621248235093	0.3305244398478800	T	T	T
0.3426225055344285	0.3249732994954456	0.3315245314722653	T	T	T
0.6726862163036559	0.3269838004862521	0.3286849469249740	T	T	T
0.0029292190318593	0.3226335479500470	0.3305226686207844	T	T	T
0.3430411650457873	0.6624583490296706	0.3309644664517191	T	T	T
0.6742311993384866	0.6625270165835001	0.3300544809120029	T	T	T
0.0023325574702749	0.6634172235206029	0.3328175757530232	T	T	T
0.0536624705544850	0.6066693356439605	0.4260416960370707	T	T	T
0.2024187382552636	0.1513010152901754	0.4733147679779975	T	T	T

0.3167357689395768	0.3268345747121073	0.4423241621527048	T	T	T
0.1454855295316050	0.5139098676175352	0.4156899738342741	T	T	T
0.2534952432294429	0.4005889710734480	0.4450419008988436	T	T	T
0.9141241113214824	0.5223891749731501	0.4469660380275767	T	T	T
0.1385190179745530	0.7448065254856170	0.4479170720284088	T	T	T
0.1939395820133892	0.1705198781091733	0.5261927139262692	T	T	T
0.0619751913288906	0.0795281332401979	0.4518752203897199	T	T	T
0.2679137242509403	0.0674654394299960	0.4647551622114701	T	T	T

MeOH@Ni-MeOH. Energy = -255.93841 eV.

2.484300000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533200	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495283

Ni C O H

36 2 2 8

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2213604425005508	0.1109040405021384	0.2200042682508229	T	T	T
0.5560712354819907	0.1141572374722408	0.2221779992922258	T	T	T
0.8876669384745811	0.1110326326770756	0.2201729110089999	T	T	T
0.2209553199299732	0.4442071687062537	0.2200018785663987	T	T	T
0.5555817231476494	0.4424836473186116	0.2216828940575699	T	T	T
0.8850682608876023	0.4427578836884193	0.2221386031948927	T	T	T
0.5543029008118779	0.7774895044548512	0.2197474965178825	T	T	T
0.8884868785765744	0.7775266924398742	0.2198184045281911	T	T	T
0.2217674766000759	0.7774045211282667	0.2198457356413780	T	T	T
-0.0016011360286616	-0.0003720713011372	0.3291650651644107	T	T	T

0.3287427717536740	0.9970423409142691	0.3285004183537442	T	T	T
0.6646507477176525	0.9959962944589267	0.3287011085170264	T	T	T
0.3289242799222153	0.3321897709316575	0.3285021467205164	T	T	T
0.6644448025384555	0.3323540118398570	0.3383935458572079	T	T	T
-0.0001720355909777	0.3320805022806841	0.3290297155550776	T	T	T
0.3319807009559932	0.6661544295988295	0.3293528591232289	T	T	T
0.6653843493727108	0.6688976899052541	0.3275095045990922	T	T	T
0.0006139584880095	0.6687703895272100	0.3283759000540500	T	T	T
0.8261962470462815	0.8404844313374783	0.5205782302545842	T	T	T
0.5394972151390482	0.1723710010090652	0.4943106640256400	T	T	T
0.6742113633336582	0.3489179185320637	0.4500807771503800	T	T	T
0.6378542203829973	0.6659568972976989	0.4939918119090999	T	T	T
0.9313188396802459	0.9262911477562055	0.4747962445582737	T	T	T
0.6613705552951880	0.4719699064488915	0.4665171155001316	T	T	T
0.7916225100799965	0.9454329672026257	0.5521745457650369	T	T	T
0.9012418750828113	0.7791950923252005	0.5564074978363820	T	T	T
0.5907390449118729	0.7087661369756577	0.4497854144556195	T	T	T
0.5759321350333497	0.2119982671908321	0.5525750533019099	T	T	T
0.3751654536879339	0.1216939114227018	0.4837595176186401	T	T	T
0.5680215204014583	0.0460208158979531	0.4794460572605354	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>OH@Ni-MeOH. Energy = -254.86608 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H

36 2 2 8

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.8888888888889001	0.11111111111111072	F	F	F

0.7777777777777788	0.8888888888889001	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111212	0.8888888888889001	0.1111111111111072	F	F	F
0.2226452458231495	0.1109829608453723	0.2191851762307083	T	T	T
0.5550599617176795	0.1121080135273284	0.2206551790345175	T	T	T
0.8880405003442254	0.1105733864420479	0.2196593383985189	T	T	T
0.2209716343787394	0.4435010623700233	0.2196244661455000	T	T	T
0.5583180817944995	0.4456944170181013	0.2235190995830088	T	T	T
0.8841712663983995	0.4414021688364927	0.2223945065547783	T	T	T
0.5559663630392271	0.7743693738008610	0.2213336362540906	T	T	T
0.8877878824414456	0.7765678811886659	0.2204516633138940	T	T	T
0.2206408971951089	0.7763092183562436	0.2194390829395661	T	T	T
0.0042806676014583	0.0046799224785481	0.3274911258841559	T	T	T
0.3285213958060338	0.9951716910852023	0.3271808070957586	T	T	T
0.6654659565431730	0.9994909541194908	0.3265467818652120	T	T	T
0.3284111809056131	0.3322789843733713	0.3277616253143155	T	T	T
0.6610398557550276	0.3236455052926008	0.3390640441619682	T	T	T
0.0008285655791302	0.3315684094674505	0.3295604476128645	T	T	T
0.3288545474443453	0.6632250805230478	0.3279180243738652	T	T	T
0.6706419537103073	0.6731101425941777	0.3381918010122010	T	T	T
0.0005792867315836	0.6647533689026606	0.3294923790664535	T	T	T
0.7057661100083166	0.7190370287147406	0.4514530360820245	T	T	T
0.4747166741790432	0.0818897080969594	0.4883748312836143	T	T	T
0.5162897540508810	0.5659207790669351	0.4828461587722545	T	T	T
0.6152132957007407	0.2772593526933281	0.4545610454164171	T	T	T
0.4049493085922903	0.5431596293728168	0.4475155199387721	T	T	T
0.7208439439682877	0.8734990067101293	0.4478024898764804	T	T	T
0.5657357545316273	0.3749357924645804	0.4691294990784912	T	T	T
0.8302318644638365	0.7308703582297627	0.4869535396909402	T	T	T
0.8108780394140953	0.6464277203608229	0.3951054334003030	T	T	T
0.4884418050575766	0.0977815454851376	0.5483778553357733	T	T	T
0.3132723142656553	0.0276392974045682	0.4713051111429545	T	T	T
0.5167426900791930	0.9675859613085470	0.4701257286653854	T	T	T

CH<sub>3</sub>OH\_to\_CH<sub>3</sub>O@Ni-MeOH. Energy = -254.86608 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495283

Ni C O H

36 2 2 8

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666636	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F

0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666641	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.6666666666666641	0.0000000000000000	F	F	F
0.00000000000000142	0.6666666666666641	0.0000000000000000	F	F	F
0.11111111111111072	0.2222222222222143	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444282	0.2222222222222143	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777641	0.2222222222222143	0.11111111111111071	F	F	F
0.444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111071	F	F	F
0.777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555571	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444282	0.8888888888888499	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777495	0.8888888888888499	0.11111111111111071	F	F	F
0.11111111111111071	0.8888888888888499	0.11111111111111071	F	F	F
0.2233081254161806	0.1119874787608219	0.219668028508530	T	T	T
0.5562979455050223	0.1131085085079207	0.2208394304034732	T	T	T
0.8890237154870625	0.1114254501694609	0.2198046840633412	T	T	T
0.2221461941225633	0.4449414489786568	0.2197738683313868	T	T	T
0.5578050239776959	0.4450602122776753	0.2225410946063067	T	T	T
0.8851979244383692	0.4426013284444374	0.2219301207154869	T	T	T
0.5556096621639941	0.7764331753100243	0.2206167814484125	T	T	T
0.8873723008041757	0.7769730979398383	0.2212658987633003	T	T	T
0.2218062681395225	0.7774255929059346	0.2193752461761204	T	T	T
0.0045857717742883	0.0035984331644900	0.3280112857537153	T	T	T
0.3303413728924416	0.9956145829467865	0.3275302225828780	T	T	T
0.6684831438231856	1.0012079569676364	0.3272713303250544	T	T	T
0.3292511788063798	0.3342756671261682	0.3285212254387793	T	T	T
0.6639396086595363	0.3268663718398861	0.3367786634593650	T	T	T
0.0012485681147016	0.3330567911754121	0.3289538790714826	T	T	T
0.3314161800907034	0.6641090610879161	0.3300012958224913	T	T	T
0.6726930748450790	0.6722430506892202	0.3338456239122617	T	T	T
0.0043884169641722	0.6680036441799116	0.3282331102558073	T	T	T
0.6949210832818576	0.8306662968537482	0.4875683912089674	T	T	T
0.4653202399474295	0.1725525047510631	0.4873079028902260	T	T	T
0.6470262828770059	0.3244274710822161	0.4488054484954794	T	T	T
0.6217040318068294	0.6469539064503073	0.4453945378945852	T	T	T
0.6761920983154706	0.9486319383355797	0.4568415082713257	T	T	T
0.6535068602683904	0.4642938767763976	0.4563334097389332	T	T	T
0.6075346376859456	0.7965507385153108	0.5393375813974298	T	T	T
0.8615133812670299	0.8974165024941346	0.4991142513642187	T	T	T
0.4566084440982925	0.6015583243030372	0.3958510567368523	T	T	T
0.5033580606304752	0.1734000888539299	0.5456691276269424	T	T	T
0.3374370992541658	0.2055612234201857	0.4813189284592780	T	T	T
0.4163532549488350	0.0188816548635868	0.4637765128487207	T	T	T

CH<sub>2</sub>OH@Ni-MeOH. Energy = -251.71834 eV.



2.48430000000000  
3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000  
-1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000  
0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495283

Ni C O H  
36 2 2 7

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2214104129143156	0.1101792619077326	0.2194403055550087	T	T	T
0.5566844601191941	0.1084644891317595	0.2216599277419847	T	T	T
0.8846334157527070	0.1070392381598144	0.2216473489470511	T	T	T
0.2215274381941720	0.4427618798033344	0.2195607364557129	T	T	T
0.5552574356354615	0.4426819311595877	0.2198140208881187	T	T	T
0.8901227477964092	0.4454045042872746	0.2212763643938850	T	T	T
0.5566065619265034	0.7780600154167999	0.2213516062879309	T	T	T
0.8901401133905836	0.7749585113434818	0.2210566318005132	T	T	T
0.2204427341202414	0.7760016860111383	0.2202859203536855	T	T	T
0.0008886202639097	-0.0024325189582361	0.3281601404408862	T	T	T
0.3311854803793792	0.0015379628109736	0.3273404613489325	T	T	T
0.6649110437785226	-0.0030647173615045	0.3373177621540718	T	T	T
0.3327926099504780	0.3319645976899864	0.3290138491953830	T	T	T
0.6666801862957793	0.3336508141732608	0.3285231969374435	T	T	T
-0.0000849507494227	0.3292116683246096	0.3278655014271541	T	T	T
0.3307744457718980	0.6619758406366841	0.3274014016959791	T	T	T
0.6673409256842818	0.6623008265894154	0.3279480612427243	T	T	T
0.0048283962851594	0.6665528411037707	0.3388559482762958	T	T	T
0.0562875670377036	0.6796703785838473	0.4437349434682315	T	T	T
0.7534788183120631	0.9228284763981952	0.4940720746496837	T	T	T

0.6228169753756657 0.9710360322561387 0.4498315565916144 T T T  
0.2272675829104739 0.6538558841607264 0.4671013457373562 T T T  
0.9104869836738599 0.5546971316462519 0.4668818993524947 T T T  
0.4757746358309763 0.8586295230008623 0.4574597015990881 T T T  
0.0894016830928560 0.8305834573409556 0.4653551030610673 T T T  
0.2074117950761302 0.5232550227403989 0.4454509195137879 T T T  
0.7175713222572596 0.9257131373624383 0.5523780721612178 T T T  
0.7327123569977360 0.7699952226440390 0.4794446678150199 T T T  
0.9143822102626760 0.0422374275385288 0.4828589637282807 T T T

CH<sub>3</sub>O@Ni-MeOH. Energy = -252.11106 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H  
36 2 2 7

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2226785566095627 0.1139543870653269 0.2213464566277401 T T T  
0.5546425375960577 0.1118684725751632 0.2205376314712633 T T T  
0.8886044262113012 0.1100215611116755 0.2194236311416130 T T T  
0.2226229475912015 0.4443997563617976 0.2198874270864591 T T T  
0.5550332186421213 0.443508189722439 0.2218658209693356 T T T  
0.8860688053781389 0.4430252379838328 0.2209971449123551 T T T  
0.5541142472622766 0.7760129347530326 0.2200002318305314 T T T  
0.8851882653645115 0.7757144289057804 0.2214090461831717 T T T  
0.2222802109711830 0.7750869773718361 0.2208008700249107 T T T

-0.0011805574451825	-0.0009767981832374	0.3293459241947045	T	T	T
0.3287776402565329	-0.0036957758598850	0.3277543064083441	T	T	T
0.6691085211401399	0.0016294854000230	0.3267191987131904	T	T	T
0.3260423571921121	0.3240392389831820	0.3326420080144634	T	T	T
0.6662124906192914	0.3284217489278232	0.3340358361392187	T	T	T
0.9959067061756541	0.3286071253357814	0.3272726967565358	T	T	T
0.3279963666503018	0.6694316064541983	0.3317391963435207	T	T	T
0.6744408260513849	0.6716101578285377	0.3321806459028261	T	T	T
-0.0000698537334042	0.6665960996011993	0.3285782062043057	T	T	T
0.4461264701600607	0.5737118705672366	0.4811984113921741	T	T	T
0.5189357312166696	0.1409895992200442	0.4925359602099039	T	T	T
0.6824711785554037	0.3157032176379881	0.4540141301658230	T	T	T
0.4446000319614951	0.5579020834199818	0.4031007156095001	T	T	T
0.8037934292873850	0.2968544571182546	0.4503196616418968	T	T	T
0.5080753210121645	0.7366418453936583	0.4969539787947529	T	T	T
0.5457579619378387	0.5183001017751989	0.5042816855145872	T	T	T
0.2867365076429005	0.4805373144270319	0.5020087825483234	T	T	T
0.5650939476919445	0.1392653813309059	0.5497285213933526	T	T	T
0.3825588257096180	0.1604043257726765	0.4907713057045731	T	T	T
0.4794219107303631	0.9944406423044101	0.4646039815195629	T	T	T

CH<sub>2</sub>OH\_to\_CH<sub>2</sub>O@Ni-MeOH. Energy = -251.20015 eV.

2.484300000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533200	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495283

Ni C O H

36 2 2 7

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666636	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000000000077	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222143	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444355	0.2222222222222143	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777706	0.2222222222222143	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555571	0.11111111111111071	F	F	F
0.44444444444444287	0.8888888888888573	0.11111111111111071	F	F	F

0.7777777777777573	0.888888888888573	0.111111111111071	F	F	F
0.1111111111111073	0.888888888888573	0.111111111111071	F	F	F
0.2222327176302200	0.1121156988636310	0.2195203960727529	T	T	T
0.5576354246859003	0.1100015735875918	0.2213759149044804	T	T	T
0.8856976863253143	0.1080194239143937	0.2210872780741790	T	T	T
0.2221515463865779	0.4448746330265067	0.2197460319780857	T	T	T
0.5547771962460650	0.4439535355093529	0.2198957714783760	T	T	T
0.8903377187125174	0.4463072442817682	0.2209312091211657	T	T	T
0.5547520260906473	0.7783100973526482	0.2219475355743854	T	T	T
0.8900937966752991	0.7763309214129969	0.2206441184592205	T	T	T
0.2213747169849859	0.7777500889055283	0.2203422484839548	T	T	T
0.0017995192136636	0.9977321608312582	0.3281120081219257	T	T	T
0.3332616869689455	0.0063391571614112	0.3270307863278646	T	T	T
0.6686741181586991	0.0020797869766744	0.3362388225431142	T	T	T
0.3313503371430433	0.3345480779285642	0.3307219500743421	T	T	T
0.6659127696272878	0.3363630925493493	0.3282577602530716	T	T	T
-0.0007195327547757	0.3285077968734625	0.3277243662671047	T	T	T
0.3323705817866415	0.6674793839372454	0.3305933343515630	T	T	T
0.6706622663407306	0.6654598467259483	0.3276872578497323	T	T	T
0.0042109220393894	0.6661413771751910	0.3374767167065224	T	T	T
0.0873374322186852	0.6469704048056247	0.4380115695041143	T	T	T
0.7836872766875287	0.9664986738082579	0.4944034744261629	T	T	T
0.6296517269584261	0.9727093658854944	0.4484017646770329	T	T	T
0.2623384498940151	0.6217562500396168	0.4419407211445749	T	T	T
0.9489538974961123	0.5137448452805448	0.4619434449673303	T	T	T
0.4944260673613887	0.8395607368090224	0.4537758507605214	T	T	T
0.1232390082291069	0.7947511043314972	0.4639265204364846	T	T	T
0.2323881774531890	0.4637651182170940	0.3967866930118042	T	T	T
0.7383002811262821	-0.0416849544977639	0.5522126536643455	T	T	T
0.8023915097230699	0.8328059534810418	0.4804316183761446	T	T	T
0.9308089179669874	1.1098317516354543	0.4844523622260793	T	T	T

CH<sub>3</sub>O\_to\_CH<sub>2</sub>O@Ni-MeOH. Energy = -251.4487 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H

36 2 2 7

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333359 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655338	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2245603069351834	0.1126069288040764	0.2222872432602867	T	T	T
0.5562367654867946	0.1097253934314864	0.2204362259965904	T	T	T
0.8893741107335924	0.1107111979492322	0.2194288529188220	T	T	T
0.2224709029165570	0.4427335214060040	0.2200193215508411	T	T	T
0.5533746672299366	0.4421966759668223	0.2212935493070508	T	T	T
0.8857005686574611	0.4431106680844875	0.2209521802602456	T	T	T
0.5562552579882794	0.7789167123771111	0.2201643358791157	T	T	T
0.8894784920569381	0.7780276625608554	0.2192988686037107	T	T	T
0.2228348031259169	0.7811331479334506	0.2207283082016860	T	T	T
1.0006136870616196	0.9964730872353356	0.3284991054481124	T	T	T
0.3344007788339765	0.9964297996684215	0.3332789447909453	T	T	T
0.6720431087676567	0.9908288911797823	0.3322755312135062	T	T	T
0.3291028215588366	0.3391448214785648	0.3347595071544822	T	T	T
0.6666345431364102	0.3323068088121048	0.3311651401517166	T	T	T
0.9994547925799493	0.3330561257497038	0.3276276518649918	T	T	T
0.3283087519340114	0.6633420833605227	0.3264843331486136	T	T	T
0.6687500454595194	0.6632629110606928	0.3272939295249784	T	T	T
0.9999620332465819	0.6662399195788614	0.3286522829592355	T	T	T
0.6356427151194501	0.0480737773138924	0.4410029302465313	T	T	T
0.1876347532469019	0.2872084830264954	0.4966616064736520	T	T	T
0.5200674659704705	0.1390230092062136	0.4204086405180305	T	T	T
0.3634112267567731	0.3659183437780609	0.4485377708735334	T	T	T
0.5419265125307596	0.8846769982584769	0.4577276429089438	T	T	T
0.4337747726459936	0.2818562957967750	0.4545147650830348	T	T	T
0.7506354236662550	0.1399533243917764	0.4833720356337086	T	T	T
0.8274286648177570	0.0973772954849332	0.3957208396184554	T	T	T
0.2402532308084237	0.3123057076040534	0.5540383473808316	T	T	T
0.1080102662048890	0.3744659697537262	0.4849040478575719	T	T	T
0.0804467088542616	0.1208962728657137	0.4867987297317745	T	T	T

CH<sub>2</sub>O@Ni-MeOH. Energy = -248.15635 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H

36 2 2 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F F F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F F F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F F F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F F F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F F F
0.2229750577928684	0.1115928519154567	0.2218484510458474	T T T
0.5551826510200634	0.1090320516420582	0.2203902151269008	T T T
0.8875098554127236	0.1094924261791518	0.2197064529111590	T T T
0.2218225510971960	0.4423989789802025	0.2202622002806510	T T T
0.5525460757248027	0.4404009396338968	0.2221657854005095	T T T
0.8841538302366575	0.4418520004719491	0.2210033243317202	T T T
0.5545975300444208	0.7760407436219805	0.2196973666084267	T T T
0.8881143261760481	0.7765392878810475	0.2192630544417531	T T T
0.2220536092337358	0.7798410166212784	0.2206321269160846	T T T
-0.0023721811312906	0.9944456104861835	0.3277627774026392	T T T
0.3311669086396202	0.9956568395609993	0.3323915422358812	T T T
0.6708617932474148	0.9892802904352804	0.3324832856776993	T T T
0.3256211076272221	0.3367415876181257	0.3346536865410417	T T T
0.6664707761528009	0.3271037015457934	0.3331707648565844	T T T
-0.0028431549872718	0.3304450245127880	0.3269912818242987	T T T
0.3301395717339595	0.6642745984842624	0.3270018842814961	T T T
0.6685156354702215	0.6638216706061395	0.3280158507776499	T T T
0.9974273082779076	0.6626232965866360	0.3284502057255206	T T T
0.6105495546401046	0.0245190164171393	0.4330019478754987	T T T
0.1671840662966860	0.2722207888431570	0.4938622948459285	T T T
0.5120502501720839	0.1387897160501969	0.4190229024002855	T T T
0.3487485328402687	0.3579278196958865	0.4483046702911401	T T T

0.5063316873467144	0.8744252950449930	0.4591559127263669	T	T	T
0.4194693678888509	0.2745926711449092	0.4547073487921423	T	T	T
0.7572082823631263	0.1152894752597825	0.4627428485373585	T	T	T
0.2127094263051520	0.2864825112012339	0.5518693900731884	T	T	T
0.0904031277154820	0.3629197083059589	0.4835939965772000	T	T	T
0.0600207485388806	0.1083681501031200	0.4801674103173987	T	T	T

EtOH@Pd. Energy = -233.96779 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2221441978601410	0.1102206804569453	0.2196730184847795	T	T	T
0.5560006565291773	0.1104357971119722	0.2199176660351264	T	T	T
0.8891780609087833	0.1099248914066167	0.2195310362519007	T	T	T
0.2234834375282140	0.4450815256887038	0.2206462253491065	T	T	T
0.5559512180109164	0.4432847710211790	0.2199883493846119	T	T	T
0.8887840121724319	0.4432632000502665	0.2198112089616926	T	T	T
0.5545751568435975	0.7759895400054098	0.2205219440590421	T	T	T
0.8889402275167939	0.7769826568785103	0.2195950810813119	T	T	T
0.2230945603120881	0.7764018951314305	0.2204095300727134	T	T	T
0.0008271951275666	0.9976618779493083	0.3301720357327588	T	T	T
0.3341306430682917	0.9991352619639161	0.3296585128689441	T	T	T
0.6686137800129840	0.9992175924188160	0.3295288073781385	T	T	T

0.3338733583477989	0.3294230356053314	0.3298250576475306	T	T	T
0.6674080902406926	0.3309732692241400	0.3301621682763893	T	T	T
0.9991485230637358	0.3291942927366154	0.3292971271285015	T	T	T
0.3342636777113531	0.6632435553717879	0.3325566571079463	T	T	T
0.6688152488004180	0.6645916975164076	0.3298095396701115	T	T	T
0.9994099145495172	0.6646643674030251	0.3293717774954492	T	T	T
0.1669265235347657	0.5764518004115216	0.4783667990088702	T	T	T
0.1852313476518231	0.6291237012332324	0.5497722876575930	T	T	T
0.3396343402882471	0.6910673172119309	0.4438638401609502	T	T	T
0.3672624883427935	0.8197124229415690	0.4455317264966058	T	T	T
0.1392650815955163	0.4345314340352476	0.4711666973377113	T	T	T
0.0554791556344526	0.5376516234236303	0.5755814231772457	T	T	T
0.2972636852773848	0.6169337135063497	0.5729230606358819	T	T	T
0.2136079975597948	0.7718623055920014	0.5557555622804348	T	T	T
0.0548976278423645	0.5881903383109067	0.4541567993541556	T	T	T

EtOH\_to\_CH<sub>3</sub>CHOH@Pd. Energy = -233.02851 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000071	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.11111111111111072	0.2222222222222143	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444287	0.2222222222222143	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777644	0.2222222222222143	0.11111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444287	0.8888888888888573	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777644	0.8888888888888573	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111072	0.8888888888888573	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218579314101941	0.1097895598442048	0.2196769061540828	T	T	T
0.5549077935407531	0.1090973539491328	0.2204168634577320	T	T	T
0.8887402604154701	0.1099222557711064	0.2206572470360009	T	T	T



0.2207412620320338	0.4426587402988695	0.2203979250322565	T	T	T
0.5540701378987114	0.4435212792731460	0.2194004265094516	T	T	T
0.8883249216128358	0.4425279679772909	0.2201124737812854	T	T	T
0.5560232404267735	0.7797998330202099	0.2220632779232717	T	T	T
0.8878061925634562	0.7756077906485589	0.2198715327632001	T	T	T
0.2211909214170855	0.7756239877132952	0.2199390248969857	T	T	T
0.0009368827230065	0.9947228445588134	0.3298149630235128	T	T	T
0.3300236880469394	0.9954372363355020	0.3298424917077646	T	T	T
0.6654485273602567	0.9931975649681265	0.3339141966438060	T	T	T
0.3312538378771696	0.3285770386631713	0.3303571322064323	T	T	T
0.6637591200412681	0.3315631097020193	0.3288015688538814	T	T	T
0.9993052888643071	0.328966659572775	0.3323074998050590	T	T	T
0.3292906089812529	0.6604622957783822	0.3304515789857772	T	T	T
0.6647235599019565	0.6604315925077171	0.3301054281133622	T	T	T
0.9986105996122463	0.6624995976906553	0.3300166395934339	T	T	T
0.6887595294413718	0.0445567166543405	0.4465017808979001	T	T	T
0.8484350151972183	0.0818861401212145	0.4901986785696135	T	T	T
0.6070281306093954	0.1453786960538140	0.4643546536094000	T	T	T
0.4954958230837612	0.1059869271244619	0.4370003615043427	T	T	T
0.7941143773127208	0.0285304608978391	0.5393710303827172	T	T	T
0.9190124950567032	0.0103796195408827	0.4713174678715267	T	T	T
0.9480954940537915	0.2303517455583053	0.4937350195292916	T	T	T
0.5906249677347445	0.8955459451697463	0.4397589973401138	T	T	T
0.8130386447840132	0.1510530309342345	0.3895071259975592	T	T	T

CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH\_to\_CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>O@Pd. Energy = -233.47249 eV.

2.7860000000000000

2.9999999999999996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.4999999999999998	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F

0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111001	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111001	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2222363443874011	0.1110993585208717	0.2205684645314402	T	T	T
0.5547581240435996	0.1098041852146275	0.2210353062849099	T	T	T
0.8891164780467961	0.1109475754719802	0.2199039982995979	T	T	T
0.2221773398406497	0.4445574558360711	0.2195926482585396	T	T	T
0.5558900643800380	0.4440638621345515	0.2200302622528982	T	T	T
0.8888862275787881	0.4443534772713831	0.2195175743957416	T	T	T
0.5560423412165699	0.7770442721255960	0.2199863347937118	T	T	T
0.8896571566940966	0.7781851623904983	0.2201788181070771	T	T	T
0.2241083899267364	0.7793151941239308	0.2213571969315968	T	T	T
0.0021030261381544	0.0006019996780836	0.3316952193032391	T	T	T
0.3353220110023335	0.9932832732111149	0.3326959442726530	T	T	T
0.6700701676175380	0.9980373321403087	0.3299821885403010	T	T	T
0.3321556748326281	0.3327685748937202	0.3307147322653105	T	T	T
0.6684742512377336	0.3324735324170469	0.3301701264739501	T	T	T
-0.0000051817088785	0.3325047025822880	0.3299393763585399	T	T	T
0.3344742928011536	0.6629331964191009	0.3303844257607518	T	T	T
0.6682328161350443	0.6654053594653618	0.3299724829013114	T	T	T
0.9992828924165911	0.6627051298883132	0.3295919551524801	T	T	T
0.4493140388370583	0.1632745347381083	0.4655714734762835	T	T	T
0.3925559011270260	0.2568492542620455	0.5166735260544126	T	T	T
0.2925634620051105	0.0372922889165920	0.4286568340966844	T	T	T
0.5114302803427764	0.0862694419822763	0.4875875904506577	T	T	T
0.5583188214860338	0.2714623955024591	0.4330926917363347	T	T	T
0.2131862592352832	0.1374484101676840	0.3831641892536483	T	T	T
0.5113341058745147	0.3471350026363246	0.5477453578372372	T	T	T
0.3418757239599148	0.3411898436452522	0.4929736405460468	T	T	T
0.2820243593202839	0.1530467618174767	0.5476982084555070	T	T	T

CH<sub>3</sub>CHOH@Pd. Energy = -230.20967 eV.

2.786000000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 1 5

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F

0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218367026545568	0.1114005307627662	0.2208444423273336	T	T	T
0.5550951012690720	0.1102972898976248	0.2194251468731598	T	T	T
0.8880846597749947	0.1093689472851046	0.2199524862824946	T	T	T
0.2218386670245567	0.4424584498696796	0.2210997895133080	T	T	T
0.5522812791265758	0.4422830510692848	0.2213836250435890	T	T	T
0.8875354174313628	0.4438158875415392	0.2194365937764729	T	T	T
0.5540220845486428	0.7759879557621272	0.2199058846658468	T	T	T
0.8880712174793818	0.7777747939051830	0.2205209447803106	T	T	T
0.2205185365610670	0.7757985557293066	0.2196730205968439	T	T	T
0.9975925653685215	0.9977424913201881	0.3313949273041434	T	T	T
0.3321923122684832	0.9961066108248353	0.3288124200258676	T	T	T
0.6637589769791745	0.9971473076525159	0.3294287237765514	T	T	T
0.3286800620347830	0.3294330149705085	0.3374410523857637	T	T	T
0.6639770456065391	0.3306484873624580	0.3297420243440138	T	T	T
0.9960612893410457	0.3323914345950117	0.3289485266308855	T	T	T
0.3306496191944799	0.6641019831192632	0.3300450348653505	T	T	T
0.6631695068908416	0.6632387317823039	0.3302422681544850	T	T	T
0.9974194325453301	0.6641914817558595	0.3301982863813594	T	T	T
0.2779588677544505	0.2868130604414179	0.4362928207187112	T	T	T
0.4529456801895642	0.3345952877711657	0.4725530684925207	T	T	T
0.1339034557178197	0.1048564284480462	0.4466273359037769	T	T	T
0.5599516018909549	0.4782319759754944	0.4627573524019129	T	T	T
0.4242639592602689	0.3183864074967818	0.5256151777279754	T	T	T
0.5076747993854979	0.2439374365723220	0.4581845567672168	T	T	T
0.2213941889639507	0.3777800928288582	0.4470363343640621	T	T	T
0.1854301264777127	0.0216563131987780	0.4433980050862028	T	T	T

CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>O@Pd. Energy = -229.92909 eV.

2.7860000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2227684530974959	0.1105859996130435	0.2195572924522546	T	T	T
0.5564467628428931	0.1122195446356341	0.2215624572233126	T	T	T
0.8885679885324816	0.1106327414431139	0.2195609154308469	T	T	T
0.2228064115628894	0.4449723994645559	0.2195310791211997	T	T	T
0.5561622173218548	0.4446509877027567	0.2194225688461950	T	T	T
0.8888974670429319	0.4444107888669676	0.2193640399872381	T	T	T
0.5565802705504939	0.7769245869445017	0.2215417401270939	T	T	T
0.8889224949247286	0.7773097074880484	0.2194247401155211	T	T	T
0.2211888048341139	0.7769331810318486	0.2214836887846098	T	T	T
0.0015695296441721	0.0014060922603051	0.3288621100733832	T	T	T
0.3337551568382356	0.9991904965962747	0.3310795591485843	T	T	T
0.6672483609951906	0.9994365855633365	0.3310900634059262	T	T	T
0.3321325970194305	0.3321206779125447	0.3287043314038042	T	T	T
0.6607906844780280	0.3204914864031448	0.3297908617729730	T	T	T
0.0015435697637117	0.3319479931856569	0.3286966843377505	T	T	T
0.3342397856546600	0.6664381075207015	0.3310292651563794	T	T	T
0.6617785653540889	0.6724807434687731	0.3303005769779013	T	T	T
0.0124946848554739	0.6718145331743155	0.3297933885975576	T	T	T
0.7829269136919288	0.5524281821575762	0.4640642634304083	T	T	T
0.9119415856716264	0.7444522604489827	0.4897928079353144	T	T	T
0.7784057803386495	0.5528604500610760	0.3937329729159238	T	T	T
0.8284503850292742	0.4546287530608081	0.4788179397294137	T	T	T
0.9140158716342076	0.7428015499800812	0.5435364172257280	T	T	T

0.0532258835560520 0.7945118786414740 0.4717051671489070 T T T  
0.8666265465911209 0.8411827232413529 0.4737171266961595 T T T  
0.6401817084120476 0.4994028050108650 0.4812353395853028 T T T

CH<sub>3</sub>CHOH\_to\_CH<sub>3</sub>CHO@Pd. Energy = -229.50592 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2201062703694261 0.1096537742806935 0.2206980787628918 T T T  
0.5521237461425382 0.1087721895727747 0.2198740645123101 T T T  
0.8854100053571856 0.1080031926602212 0.2201811858579736 T T T  
0.2188725657774203 0.4411341202944065 0.2206121037978581 T T T  
0.5496670486174980 0.4412349637629103 0.2210717208787153 T T T  
0.8848192305195836 0.4431426056232006 0.2192451650019276 T T T  
0.5510015756553849 0.7747876631917382 0.2199365473776557 T T T  
0.8857372208951849 0.7776699409947400 0.2211193413397406 T T T  
0.2176866605439446 0.7741592915328072 0.2198828181139950 T T T  
0.9915237219355247 0.9951629339215821 0.3319424850186868 T T T  
0.3269837836411774 0.9910481442343319 0.3308869607471427 T T T  
0.6591785548537695 0.9951616951866384 0.3296902557577392 T T T  
0.3227631257661105 0.3278020979275095 0.3363765709185659 T T T  
0.6583463427798759 0.3280304278083807 0.3296330111790161 T T T  
0.9901251878077463 0.3310956955112155 0.3284973598327262 T T T

0.3259170462282361	0.6607478747187775	0.3302541390757070	T	T	T
0.6568391727563607	0.6597363921355531	0.3300562933847033	T	T	T
0.9922007250511111	0.6608605810215225	0.3305863811399274	T	T	T
0.2355849617511554	0.2448096030747206	0.4350105690647018	T	T	T
0.4088133305131406	0.2921116637430490	0.4721491852223293	T	T	T
0.1059799746044129	0.0664953541763493	0.4322111047534015	T	T	T
0.5112547603651505	0.4398037424930871	0.4682796050539919	T	T	T
0.3720109435358851	0.2581732886947444	0.5242061137394981	T	T	T
0.4696966123807353	0.2093573177520260	0.4548616577920270	T	T	T
0.1777686264076444	0.3373328580879909	0.4428903421942335	T	T	T
0.1835994636391323	0.9686315024028417	0.3912700652555989	T	T	T

CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>O\_to\_CH<sub>3</sub>CHO@Pd. Energy = -229.34426 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.666666865348532	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.000000020031479	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.666666865348816	0.666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.000000040063028	0.666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.111111119389463	0.222222238778997	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558065	0.222222238778997	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232402	0.222222238778997	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477557994	0.8888888955115988	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232402	0.8888888955115988	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.8888888955115988	0.111111119389534	F	F	F
0.2242351265432996	0.1111277394497677	0.2197921370356085	T	T	T
0.5571681204651932	0.1109253282671110	0.2198296559360385	T	T	T
0.8926929924732913	0.1138764739470447	0.2214537261793391	T	T	T
0.2227567681471219	0.4436675772484955	0.2209971892555356	T	T	T
0.5570801319270239	0.4449597149601043	0.2194591120232403	T	T	T
0.8902653813163344	0.4435974766842029	0.2197247558163350	T	T	T
0.5580381359577932	0.7784353379667278	0.2190776492353749	T	T	T

0.8910374793928671	0.7779321221302580	0.2200226252813918	T	T	T
0.2216249324621092	0.7768054407521321	0.2210452620092816	T	T	T
0.0048585147175386	0.9981323667255166	0.3300091951171844	T	T	T
0.3390650595414597	0.0006345584512444	0.3297529417181206	T	T	T
0.6708940631855954	0.9981520808034138	0.3296522011128752	T	T	T
0.3389698276981558	0.3328347848131755	0.3296483844784633	T	T	T
0.6684864388126343	0.3315279201176622	0.3292327475937594	T	T	T
0.0062795429029464	0.3310633790092297	0.3336287592465850	T	T	T
0.3433724622241037	0.6685169630952520	0.3288658284386070	T	T	T
0.6710823786222970	0.6670094958869264	0.3299684577287916	T	T	T
0.0066403506591679	0.6660771378048547	0.3313840399354687	T	T	T
0.9679233338108029	0.5249507266817071	0.4421089226890832	T	T	T
0.8423120106623981	0.5103023684153749	0.4981808550177759	T	T	T
0.9799681251495029	0.3750107538095529	0.4304442275594142	T	T	T
0.8293800625513275	0.6346555328812158	0.5004905037235965	T	T	T
0.7049575946113968	0.3874882836553682	0.4929453684366495	T	T	T
0.9056059690265618	0.4988458612520173	0.5438450617041551	T	T	T
0.1008103798110704	0.6583806214764046	0.4418071474463064	T	T	T
0.8559968653462401	0.5376273999618718	0.3934972418734787	T	T	T

CH<sub>3</sub>CHO@Pd. Energy = -226.2437 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C O H

36 2 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.000000020031479	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.000000040063028	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.111111119389534	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.777777910232544	0.888888955116272	0.111111119389534	F	F	F

0.1111111044883728	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.2223146708820742	0.1093991743749092	0.2204226642937513	T	T	T
0.5545552660172995	0.1079484621894915	0.2204174886797863	T	T	T
0.8885025823869485	0.1086830242136425	0.2194290144984326	T	T	T
0.2236660900619023	0.4413941198043773	0.2208603250229680	T	T	T
0.5543122189090753	0.4412123429403800	0.2202549906103773	T	T	T
0.8905656408809468	0.4429860581162267	0.2189802543438714	T	T	T
0.5556198235809473	0.7745096379140090	0.2197885278788485	T	T	T
0.8888107970669481	0.7746965504022856	0.2193988438114287	T	T	T
0.2251672628012472	0.7790723516752821	0.2216424054522672	T	T	T
-0.0026513452212125	0.9935805591056731	0.3288351732171592	T	T	T
0.3327389616381305	0.9933278890683201	0.3333985076370670	T	T	T
0.6674626773337725	0.9948309445469754	0.3292989645262023	T	T	T
0.3341565021931727	0.3268637810338594	0.3353541633126265	T	T	T
0.6720263005994339	0.3309255055145914	0.3281472557437134	T	T	T
1.0010832954291322	0.3281007098622109	0.3295529250321662	T	T	T
0.3340813463140914	0.6593147628811170	0.3302628063073997	T	T	T
0.6671665715592346	0.6612777544804809	0.3294874345672332	T	T	T
0.9999018103595517	0.6597502968917762	0.3295153727587475	T	T	T
0.3449393249507280	0.2362377811175275	0.4337383615751305	T	T	T
0.2224046430970349	0.2782226058916232	0.4753930675825377	T	T	T
0.2993989757025776	0.0625580412431593	0.4277688845720050	T	T	T
0.2596626290651800	0.4237934587252504	0.4710402045186257	T	T	T
0.0763444369667398	0.1883003059988101	0.4621555177036434	T	T	T
0.2399167067265085	0.2504755836872044	0.5269338868267525	T	T	T
0.4961661769408685	0.3388185221626391	0.4354926908944930	T	T	T

CH<sub>3</sub>CHNH@Pd. Energy = -231.94528 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd N C H

36 1 2 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F



0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2229419600765243	0.1122908921422108	0.2208621048122637	T	T	T
0.5558351733915220	0.1101684729521478	0.2196295637892698	T	T	T
0.8884438714226451	0.1099599552817737	0.2195279525099106	T	T	T
0.2223314151400947	0.4429700563890805	0.2202670701223134	T	T	T
0.5531807881700721	0.4425046255163602	0.2212241136660913	T	T	T
0.8886861525820350	0.4440499281125993	0.2193863565900629	T	T	T
0.5560530348607371	0.7772881134769029	0.2195399339908595	T	T	T
0.8887042533199861	0.7768254854443030	0.2195611355561916	T	T	T
0.2217155895276675	0.7773672602669485	0.2191921126723071	T	T	T
-0.0014554869890069	0.9962014106161009	0.3292435263781618	T	T	T
0.3326288542859768	0.9948634692841752	0.3290112773315054	T	T	T
0.6672926481684049	-0.0020411335891866	0.3296152664838277	T	T	T
0.3350791852709249	0.3310321433413123	0.3335488856927272	T	T	T
0.6696247073287844	0.3319488370586253	0.3294606249007270	T	T	T
-0.0016776628991511	0.3316587085394975	0.3288162799442155	T	T	T
0.3336378081408338	0.6669691913039664	0.3283381755547700	T	T	T
0.6690918190218147	0.6663806881520593	0.3295652311946791	T	T	T
0.0002751654174092	0.6645965624042418	0.3301156271142250	T	T	T
0.3137497319962007	0.3491361282951458	0.4307110000000023	T	T	F
0.3394373949791019	0.2694388925285128	0.4802831761794830	T	T	T
0.3975934836262800	0.1297632419864250	0.4746644203760993	T	T	T
0.5342732353532655	0.1904666573589595	0.4505150600586887	T	T	T
0.4033861942545169	0.0725509271777436	0.5222283878223150	T	T	T
0.3005482149447202	0.0155915895145370	0.4419160556368909	T	T	T
0.3163107856842886	0.3083709490620695	0.5291588270226808	T	T	T
0.2736833734475374	0.4432974572387732	0.4423751327658847	T	T	T

CH<sub>3</sub>CHNH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>CHNH<sub>2</sub>@Pd. Energy = -234.84702 eV.

2.786000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Pd C N H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F F F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F F F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F F F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F F F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F F F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F F F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F F F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F F F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F F F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F F F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F F F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F F F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F F F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F F F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F F F
0.1111111111111072	0.888888888888857	0.1111111111111072	F F F
0.2212474435887145	0.1117208994380608	0.2198567198292425	T T T
0.5568853819130389	0.1146179091226349	0.2206481548949435	T T T
0.8899371581517935	0.1120983663731037	0.2207629389866877	T T T
0.2225261689165047	0.4439428418884345	0.2207200114565925	T T T
0.5576244572758631	0.4471200934631847	0.2201530810346080	T T T
0.8852424665393280	0.4438650715717966	0.2216802821792330	T T T
0.5554047083274185	0.7797139238827632	0.2194788862430933	T T T
0.8905115776490191	0.7813101759014042	0.2206997566920666	T T T
0.2206347072704711	0.7767458061753152	0.2189351138320363	T T T
0.0070986879279399	0.0078789455812692	0.3354429527055822	T T T
0.3298179871828204	0.9943503739768844	0.3276072198229495	T T T
0.6683730237247765	1.0030359694152848	0.3291329642227562	T T T
0.3350118457479208	0.3390350799866767	0.3300178644748388	T T T
0.6586319298533996	0.3353805342333476	0.3389016182542060	T T T
0.9958178237719867	0.3369462016352475	0.3303176200830851	T T T
0.3327163920517505	0.6693537071344343	0.3293343370007372	T T T
0.6699401652252130	0.6745543877451506	0.3293728228929718	T T T
0.9972044891502185	0.6675622506278828	0.3304496473325524	T T T
0.5393192998710938	0.2975745272692079	0.4346563006811845	T T T
0.5302136532934028	0.1256347471049697	0.4622155988037591	T T T
0.3708509243780123	0.2929213309420600	0.4302033534490657	T T T
0.3767673117275427	0.4142643948778013	0.4437508529315156	T T T
0.6506339697333622	0.4278973354256334	0.4553325654024794	T T T
0.2035694236416805	0.1459648671885586	0.3892651216191859	T T T
0.5007069018873902	0.1189057306122484	0.5151269616950633	T T T
0.4169457067324767	0.9991250216821961	0.4397420920394429	T T T
0.6607610510309088	0.1257151566566472	0.4555729694127263	T T T

CH<sub>3</sub>CHNH\_to\_CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>NH@Pd. Energy = -234.89683 eV.

2.786000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218510255721276	0.1123144716913691	0.2201461950001765	T	T	T
0.5544317243275061	0.1133424934136283	0.2196588496227151	T	T	T
0.8892275538198083	0.1126075774248923	0.2193033056284815	T	T	T
0.2225782532086277	0.4444276935465771	0.2206890500533488	T	T	T
0.5563330458310460	0.4465996387354755	0.2197808841359935	T	T	T
0.8879385056261677	0.4456527556833061	0.2201411003896762	T	T	T
0.5548148227154619	0.7793712225880536	0.2196984321760001	T	T	T
0.8866274451217352	0.7771046616314159	0.2221519728022429	T	T	T
0.2236723868000772	0.7759686451824995	0.2227596140120163	T	T	T
0.0021810525119353	0.0060422069427165	0.3302227336688410	T	T	T
0.3335065181619876	0.0028264324761179	0.3307704560586335	T	T	T
0.6702865832378294	0.0113946561642826	0.3280733915898543	T	T	T
0.3310943408510925	0.3308950158089992	0.3309354856192990	T	T	T
0.6689878885050369	0.3397039876948204	0.3311725883775848	T	T	T
0.9986402882913605	0.3383704028572532	0.3291682063899712	T	T	T
0.3355962742165509	0.6738407432974663	0.3344415092003808	T	T	T
0.6766343953778508	0.6822680188119425	0.3314748919309433	T	T	T
0.0025921498796487	0.6722364152751878	0.3313741847481814	T	T	T
0.4192658977922941	0.4491862100396734	0.4316963114433584	T	T	T
0.2393899453927237	0.3657432258385673	0.4693212002750400	T	T	T
0.4880229210240052	0.6315423587418727	0.4050582183217898	T	T	T

0.5406068174813345 0.7345458492304222 0.4396130136762662 T T T  
0.5278714517927551 0.4483892334491753 0.4621592398430528 T T T  
0.4645487846276943 0.3262020894511689 0.3906562653387163 T T T  
0.2608010358052064 0.4425894981524360 0.5154719385176937 T T T  
0.1307705061857339 0.3729326422140510 0.4409951958907230 T T T  
0.1915522580131669 0.2204834649072094 0.4810966301966215 T T T

CH<sub>3</sub>CHNH<sub>2</sub>@Pd. Energy = -235.91805 eV.

2.786000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2224278951504779 0.1111814909838521 0.2197138683676720 T T T  
0.5565477469063751 0.1133601977866537 0.2212394084832104 T T T  
0.8889857882037364 0.1112857639831336 0.2197531670273964 T T T  
0.2225833612795674 0.4446230817436787 0.2198159268814309 T T T  
0.5571004747556890 0.4433693834345412 0.2209305852814657 T T T  
0.8872391447296424 0.4436118501760908 0.2213241283198100 T T T  
0.5551618237790674 0.7776303340985838 0.2195540682028374 T T T  
0.8894025458345123 0.7778540524211052 0.2197149258159161 T T T  
0.2224824735791852 0.7775929876078463 0.2197260164940721 T T T  
0.0004098875201410 0.0001740441044824 0.3297157488678586 T T T  
0.3323786286143497 0.9987083273268225 0.3297149865846782 T T T  
0.6666209839593689 0.9993861152310268 0.3292842471020059 T T T

0.3334515254057158	0.3332947367238697	0.3295617102041274	T	T	T
0.6669807614996306	0.3325779528197265	0.3384045229090819	T	T	T
0.0004256622285038	0.3336298738887903	0.3298265031525088	T	T	T
0.3335114404719293	0.6666506164423383	0.3303458228761875	T	T	T
0.6674876950328964	0.6682715368107569	0.3290105586398118	T	T	T
0.0005620200610838	0.6671037337617438	0.3299668611478870	T	T	T
0.6628618010174150	0.3435000498860847	0.4421827865967051	T	T	T
0.6600365242886890	0.1759853473651909	0.4703768257639472	T	T	T
0.5150846765498351	0.3647519825079458	0.4597650403198735	T	T	T
0.7734915785959277	0.1601690316617122	0.4503651471027247	T	T	T
0.6764723899125586	0.1907848944584453	0.5239909109586568	T	T	T
0.5286644442860469	0.0491318725427238	0.4595797316404465	T	T	T
0.7950356472086886	0.4736468122810281	0.4465408848242802	T	T	T
0.5167892128537337	0.4827154945144281	0.4449145002188892	T	T	T
0.3865855190502049	0.2496526023383503	0.4591511533612010	T	T	T

CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>NH@Pd. Energy = -235.73722 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2206813097876145	0.1096096941430595	0.2200576619276676	T	T	T
0.5530053927519105	0.1090427213766601	0.2200275587510928	T	T	T
0.8865447777515947	0.1111175482235440	0.2191615689211967	T	T	T

0.2240329239435986	0.4429144845344625	0.2228848574907939	T	T	T
0.5532326108920610	0.4428524740906450	0.2199118575407819	T	T	T
0.8908864757966337	0.4449639816548079	0.2187614735583320	T	T	T
0.5538093698661211	0.7762490352569850	0.2200262967756702	T	T	T
0.8865065402057403	0.7744067924842104	0.2192078654496883	T	T	T
0.2240767721624561	0.7802025614661199	0.2230674314195670	T	T	T
0.9871686426026969	0.9926663762585560	0.3270824270086340	T	T	T
0.3248407247752905	0.9944652157914735	0.3347858629881640	T	T	T
0.6610443593634404	0.9957192335792974	0.3297345742324891	T	T	T
0.3253253322116923	0.3288562225555370	0.3340318783270814	T	T	T
0.6708530209400736	0.3342546381454406	0.3266225853871301	T	T	T
0.9946231726740474	0.3299421980596788	0.3305598892216611	T	T	T
0.3286012102621330	0.6634027331261267	0.3319226390095416	T	T	T
0.6611304603041924	0.6633078329532148	0.3297693745443174	T	T	T
0.9944967695261708	0.6625170974830538	0.3305585798710660	T	T	T
0.4796523870580439	0.2434562834897614	0.4583748137161021	T	T	T
0.4756006126907745	0.3964296049462041	0.4973143153881713	T	T	T
0.3346921500077151	0.1672077658998564	0.4081400994992224	T	T	T
0.6159847508479052	0.2970525669104547	0.4341336198755023	T	T	T
0.4610693038974553	0.1294181763362778	0.4906023617632008	T	T	T
0.2076673088413645	0.1063210369495278	0.4306670598470178	T	T	T
0.3409289417211407	0.3460823759321124	0.5213010722194603	T	T	T
0.5002132275194935	0.5109750210518035	0.4644924791089967	T	T	T
0.5832040119793720	0.4486157379640377	0.5352245127273481	T	T	T

CH<sub>3</sub>CHNH<sub>2</sub>\_to\_CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Pd. Energy = -239.06261 eV.

2.7860000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 2 1 7

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F

0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2209651088588324	0.1101111872493345	0.2204511512384137	T	T	T
0.5557530359839863	0.1129615073812407	0.2218505360133201	T	T	T
0.8869580107906799	0.1091956408094557	0.2200048510260384	T	T	T
0.2210651840105259	0.4409012723526218	0.2214030076646575	T	T	T
0.5538409887955497	0.4432053864423796	0.2196529545986503	T	T	T
0.8865852434705167	0.4421072180563768	0.2207747757773573	T	T	T
0.5532198294861401	0.7765986593426807	0.2196877845759556	T	T	T
0.8882756400406322	0.7764804231865496	0.2195289698491161	T	T	T
0.2198852818406329	0.7748181593827931	0.2192827822609360	T	T	T
0.9957495979399902	0.9960311344680886	0.3298337359909365	T	T	T
0.3248342570003524	0.9888852661504356	0.3290264244871090	T	T	T
0.6626689271981849	0.9945135667436216	0.3299798042676597	T	T	T
0.3278724718155168	0.3290296030203331	0.3325267481114214	T	T	T
0.6573532860556649	0.3254304117171535	0.3339907332792337	T	T	T
0.9947363831204329	0.3288532671914841	0.3305030476478705	T	T	T
0.3279400337920552	0.6628556744413447	0.3303706037113821	T	T	T
0.6647322093918623	0.6678931215194926	0.3287751074431464	T	T	T
0.9961911166337354	0.6626508908367851	0.3308513424126691	T	T	T
0.5966215579234770	0.3810235669660280	0.4408160769230440	T	T	T
0.6252622118276712	0.2348794281069544	0.4736122490754015	T	T	T
0.4047615960321074	0.3325801155554043	0.4337648518605010	T	T	T
0.6710373181680063	0.5123789357440538	0.4674785795231519	T	T	T
0.3731698904961170	0.4236410705948621	0.4554108197806003	T	T	T
0.3149873304731924	0.1996617570708776	0.4481019445250635	T	T	T
0.7117307614711936	0.5019865800096888	0.3863314395100488	T	T	T
0.5866649953502732	0.2243786067942538	0.5257501838650533	T	T	T
0.5418306269647919	0.0988536156977744	0.4502343330901297	T	T	T
0.7706511677145860	0.2710752356580154	0.4703330360539167	T	T	T

CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>NH\_to\_CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Pd. Energy = -238.60797 eV.

2.786000000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495336

Pd C N H

36 2 1 7

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F

0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226595943293561	0.1106192435257281	0.2206264712735611	T	T	T
0.5539016944878903	0.1099541658753841	0.2211292421516468	T	T	T
0.8884757276496213	0.1106998293127959	0.2192667296090750	T	T	T
0.2221076056422490	0.4440176774589981	0.2197629336654034	T	T	T
0.5555025522552125	0.4435514812176267	0.2202154694162552	T	T	T
0.8879482760100936	0.4432959801046803	0.2200342504094919	T	T	T
0.5553762015657300	0.7769577849624433	0.2196741871533656	T	T	T
0.8884955603323612	0.7762552296577307	0.2196189529078952	T	T	T
0.2231644541051125	0.7792551534133104	0.2221150693291106	T	T	T
0.9979843234015228	0.9976162612050231	0.3284170437108815	T	T	T
0.3289318334014260	0.9888158924159647	0.3348265906202731	T	T	T
0.6685612900907527	0.9971963590959064	0.3290208286345955	T	T	T
0.3339338069602537	0.3347157890014248	0.3314828544367246	T	T	T
0.6661266927456270	0.3331169419857121	0.3323832683935673	T	T	T
0.9994514312136225	0.3307948936087647	0.3297797407805262	T	T	T
0.3321745304074098	0.6616713070408449	0.3304659860926074	T	T	T
0.6674483129847594	0.6664377769315748	0.3299383011274212	T	T	T
0.9971098764857605	0.6616526566850185	0.3303451499930057	T	T	T
0.4245902962239975	0.0302604548401952	0.4829498310178933	T	T	T
0.6210272569599178	0.0706154933598583	0.4735643488384035	T	T	T
0.3495820986198243	0.0783684348588202	0.4271218517353519	T	T	T
0.3345549082040594	0.8823146007125020	0.4952078145716639	T	T	T
0.4788859378837884	0.2917356669063266	0.3831484774971082	T	T	T
0.2292014155618180	0.0762163778581922	0.4388077154590029	T	T	T
0.4192738824824421	0.1101152096500308	0.5251760411452429	T	T	T
0.6753310682533458	0.0445203741525976	0.5187720342207148	T	T	T
0.6263234856091449	-0.0215766767935916	0.4353812875697057	T	T	T
0.7123224712408212	0.2150747482458939	0.4584932976032277	T	T	T

CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>@Pd. Energy = -240.03242 eV.



2.7860000000000000  
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

Pd C N H

36 2 1 7

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2238128113533310	0.1131933566486537	0.2209295773216070	T	T	T
0.5564823874419225	0.1114769457811841	0.2198018755014688	T	T	T
0.8892247665456249	0.1116205381337212	0.2197410978449081	T	T	T
0.2238364182791747	0.4445026378183972	0.2210670380854946	T	T	T
0.5537150279316579	0.4436992614957856	0.2215055984669162	T	T	T
0.8895894278797433	0.4452749790083826	0.2194162090312788	T	T	T
0.5565012025868755	0.7787042388348402	0.2199138853748835	T	T	T
0.8890287156354202	0.7777355191333116	0.2194693499076321	T	T	T
0.2226753459351413	0.7781476125055848	0.2195861491172575	T	T	T
0.0002520688503671	0.9997166788926136	0.3291059206833010	T	T	T
0.3349519893800715	-0.0000019738378282	0.3295603040476366	T	T	T
0.6686410637848526	0.0018903083240598	0.3301036771237932	T	T	T
0.3363715025097705	0.3361070892276196	0.3350731679948851	T	T	T
0.6704233143771177	0.3347811886165635	0.3293874800326154	T	T	T
0.0001817658684112	0.3352673777138716	0.3292648691116196	T	T	T
0.3348581465544049	0.6697886192582969	0.3297681625711149	T	T	T
0.6709114676122911	0.6705515855623632	0.3297824885900855	T	T	T
0.0020523085307928	0.6683610509424502	0.3301221347803664	T	T	T
0.4556734872144482	0.3433422229886559	0.4818270320879097	T	T	T
0.5943238756563848	0.5472337553819832	0.4878117341697811	T	T	T

0.2997792531239269	0.3098820759036987	0.4384453510229884	T	T	T
0.5200431983931548	0.2677932454368774	0.4608601641204461	T	T	T
0.3999214094785164	0.2840778920858510	0.5303721459304211	T	T	T
0.2475875502658756	0.3938420996982597	0.4509128303127234	T	T	T
0.1936064502622494	0.1757725645846944	0.4423625200999117	T	T	T
0.5301129495479825	0.6246673812110830	0.5071619681443066	T	T	T
0.6546600348162652	0.6058349599437184	0.4392989219250014	T	T	T
0.7079103774192487	0.5691935438120390	0.5204098311099812	T	T	T

EtOH@Ni. Energy = -241.61045 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H  
36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226752494622846	0.1114640620515319	0.2198420389485299	T	T	T
0.5567056001487071	0.1115734598363625	0.2199908006211583	T	T	T
0.8901516263147486	0.1114119362402127	0.2198272796454546	T	T	T
0.2248991868079737	0.4475979750877464	0.2218299747905637	T	T	T
0.5567626199466341	0.4450818315268183	0.2201787265803518	T	T	T
0.8901571739988545	0.4450945737319426	0.2200251527769046	T	T	T
0.5544485514483818	0.7770547337687579	0.2217885121230725	T	T	T
0.8897255324358688	0.7785688623429965	0.2199129072446659	T	T	T
0.2245793277103666	0.7774002714876962	0.2215837885081247	T	T	T

0.0021933165627711	0.0007672476100603	0.3292628009336435	T	T	T
0.3362770180283145	0.0040616892014660	0.3283631013843959	T	T	T
0.6709330497975673	0.0036919649342295	0.3284090130172850	T	T	T
0.3356657311598878	0.3316639825256245	0.3287420807163491	T	T	T
0.6686562630995957	0.3338540648682177	0.3294231496937571	T	T	T
0.9994392107297695	0.3314956922388905	0.3282974132010970	T	T	T
0.3347486828490522	0.6666035588472982	0.3363077496539386	T	T	T
0.6707016108728650	0.6670681067930337	0.3289462177126790	T	T	T
0.9995933645842190	0.6672235492585629	0.3282997182615180	T	T	T
0.1583695055660123	0.5624388624039283	0.4944029427506433	T	T	T
0.1942790722538653	0.6238346508822198	0.5742712140800164	T	T	T
0.3446506898605581	0.6889393262835586	0.4513364001274133	T	T	T
0.3848995193712032	0.8352856410469285	0.4572397060931767	T	T	T
0.1249289601210833	0.4027599173535829	0.4854412149824885	T	T	T
0.0541537763171486	0.5225636606161962	0.6061538079907495	T	T	T
0.3237780179810967	0.6101761988401802	0.5966332602473761	T	T	T
0.2277609034559354	0.7842118428043501	0.5818678683186985	T	T	T
0.0287178386733795	0.5758208965337982	0.4711203982774654	T	T	T

H3CH2OH\_to\_CH3CHOH@Ni. Energy = -240.88905 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111107	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F

0.2216760623934763	0.1114731594141162	0.2203128065267368	T	T	T
0.5565496460739363	0.1097739165268195	0.2217017490167938	T	T	T
0.8879457391430819	0.1108863389683245	0.2206941913650593	T	T	T
0.2219230232913710	0.4442014090758362	0.2203330483077370	T	T	T
0.5548538193646164	0.4443501213909627	0.2200814837299839	T	T	T
0.8885900600193347	0.4442015069410592	0.2204098407361148	T	T	T
0.5567357122993957	0.7807680164978480	0.2217623537656114	T	T	T
0.8886287762404579	0.7782854898514409	0.2205137942199088	T	T	T
0.2220741786082705	0.7777600244855953	0.2202020944928966	T	T	T
0.0008072635967244	0.0005451059965386	0.3299823804409770	T	T	T
0.3294662860579863	0.9991338413956834	0.3285926167180852	T	T	T
0.6670634370767023	0.0004120025572817	0.3377937053115709	T	T	T
0.3341589906383616	0.3338899786888296	0.3296648088140076	T	T	T
0.6651737655732867	0.3361415188438506	0.3286127150175970	T	T	T
0.0014856301772501	0.3350316242371913	0.3298229996616425	T	T	T
0.3302700596077168	0.6653071364384754	0.3286893582913019	T	T	T
0.6652687386618453	0.6634318614479017	0.3287145579437600	T	T	T
0.0001047655773789	0.6674118808086111	0.3293535488440033	T	T	T
0.6904353701125269	0.0240518370328549	0.4578056637305647	T	T	T
0.8491901185696225	0.0206229166773740	0.5076413936887340	T	T	T
0.6405913243038110	0.1702766758965212	0.4797290478076446	T	T	T
0.5242951043516330	0.1558985451299620	0.4490430599686148	T	T	T
0.7820238426018734	0.9736250827515177	0.5628777091285592	T	T	T
0.8928171261958471	0.9089049849336156	0.4873534656665144	T	T	T
0.9887997189283302	0.1742173727472790	0.5113301539523818	T	T	T
0.5550921642371953	0.8687302868122868	0.4476771471222778	T	T	T
0.8556795193933342	0.1154102143240361	0.3927806997889143	T	T	T

CH3CH2OH\_to\_CH3CH2O@Ni. Energy = -240.74759 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495345

Ni C O H  
36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F

0.1111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2215958483288423	0.1107594083142641	0.2207047250263030	T	T	T
0.5529725822612360	0.1102291957439660	0.2214975467746562	T	T	T
0.8881002503006631	0.1117920883758126	0.2201397685863191	T	T	T
0.2236188163462724	0.4444405047303265	0.2216242925343808	T	T	T
0.5556592288875888	0.4441335558795568	0.2203069789024965	T	T	T
0.8899877881641652	0.4437776240456504	0.2203403714602010	T	T	T
0.5556713317478162	0.7778536347204812	0.2204648264302659	T	T	T
0.8887040584313733	0.7758110798171320	0.2193873924459196	T	T	T
0.2242528832339854	0.7812826499898005	0.2220544313399116	T	T	T
0.9851704403673167	0.9926773304314157	0.3270401489046438	T	T	T
0.3302946834972657	0.9991730454782174	0.3353525435534295	T	T	T
0.6635745853419633	0.9991120819160422	0.3296787038123791	T	T	T
0.3394616724926321	0.3405194750412258	0.3305142045731288	T	T	T
0.6742303753240696	0.3363452514426741	0.3284949720987630	T	T	T
0.0017066782135948	0.3290998356065761	0.3320120279969773	T	T	T
0.3335719798963024	0.6692113391614394	0.3297946462172538	T	T	T
0.6670517621211340	0.6668839129062279	0.3288105435126173	T	T	T
0.9990645184067014	0.6640033929164945	0.3289205553238936	T	T	T
0.3446925872014122	0.2231803674603909	0.4961379249086060	T	T	T
0.5604265550766649	0.2570751129463979	0.5068313456296962	T	T	T
0.2733698276089664	0.1549393963747429	0.4220151204226107	T	T	T
0.2329371608813875	0.1020706080744738	0.5332385869095924	T	T	T
0.3404318104601384	0.3669316253620312	0.5057669484699329	T	T	T
0.1265535357200527	0.1899939728256914	0.3939602103499773	T	T	T
0.6125054936350712	0.3069604418459909	0.5634468448005463	T	T	T
0.5642851229901089	0.1138708317664718	0.4960624571861015	T	T	T
0.6709338413319982	0.3786362530135992	0.4693951964868225	T	T	T

CH3CHOH@Ni. Energy = -237.52099 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H

36 2 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2221669831411358	0.1121486154044671	0.2215658218302860	T	T	T
0.5563141079880772	0.1116554343039521	0.2197021852319384	T	T	T
0.8902178689444390	0.1101777054877549	0.2213637321955115	T	T	T
0.2230868656719761	0.4431635130972663	0.2209981357629928	T	T	T
0.5529488317752418	0.4432380524580640	0.2213887255904866	T	T	T
0.8882910992363124	0.4444025530772166	0.2197956357549688	T	T	T
0.5554624875174736	0.7773736092669783	0.2202489549082217	T	T	T
0.8895412556665390	0.7799853878115633	0.2219799784278862	T	T	T
0.2215226107521948	0.7770561698901237	0.2200434727638250	T	T	T
0.9991075284156020	0.9990693819281654	0.3348180451211568	T	T	T
0.3363577546332901	0.9973835381720600	0.3274087075249681	T	T	T
0.6648892443791352	0.9994143488820991	0.3288740668128849	T	T	T
0.3301551869895333	0.3313456982791965	0.3379552909900743	T	T	T
0.6660369461125166	0.3331415948547863	0.3287749398153487	T	T	T
0.9978915659385733	0.3367358524818425	0.3278513981599440	T	T	T
0.3336362738061367	0.6672741396240331	0.3291394053688573	T	T	T
0.6640867038149321	0.6646572587802098	0.3292736690691389	T	T	T
0.9996881490339249	0.6651134175636420	0.3288557712315161	T	T	T
0.2477809617674333	0.2709213914054731	0.4407132977151674	T	T	T
0.4215935934159660	0.3069515429767607	0.4920738290922054	T	T	T
0.0752118840206898	0.0586049913178437	0.4465787885760086	T	T	T
0.5450763758618317	0.4699794557196656	0.4896147069318177	T	T	T
0.3631379277125485	0.2705017753125176	0.5489535416784742	T	T	T
0.4908298128217849	0.2113061746819809	0.4773911267610211	T	T	T
0.1787389756546864	0.3664906525503549	0.4554918225955659	T	T	T
0.1339451985064902	0.9669836031138274	0.4529275213326500	T	T	T

CH3CH2O@Ni. Energy = -238.12035 eV.

2.48430000000000  
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H  
36 2 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2222910784770294	0.1124390823748689	0.2210203523026802	T	T	T
0.5566202315191902	0.1127169128153595	0.2211374843540805	T	T	T
0.8886792728655364	0.1110268554533160	0.2202578835439234	T	T	T
0.2222879513371732	0.4431787649247614	0.2210258793603209	T	T	T
0.5554092587945887	0.4443807854555656	0.2203733728894407	T	T	T
0.8870922209463176	0.4432265390726930	0.2210904890815620	T	T	T
0.5566241928704978	0.7773989134057032	0.2211095803334260	T	T	T
0.8870794873880379	0.7772688887309483	0.2210922109835927	T	T	T
0.2219323203680287	0.7776862381564154	0.2192518918211518	T	T	T
0.9991130315128964	0.0001605578759056	0.3293003825581728	T	T	T
0.3305933004633890	0.9949601460007147	0.3282934395274313	T	T	T
0.6672100730807066	0.0003291900214473	0.3294053799794183	T	T	T
0.3271663228957055	0.3301864027015450	0.3328082153856036	T	T	T
0.6691020447376527	0.3304528751359359	0.3332927844967947	T	T	T
0.9991054358531528	0.3323231333091957	0.3293151837497182	T	T	T
0.3305281180043708	0.6689982545246200	0.3282658428266932	T	T	T
0.6689102735398570	0.6720586476002710	0.3331987794869891	T	T	T
0.0045742820325674	0.6689543844534380	0.3283447980367223	T	T	T
0.5472009744819807	0.4414731545655640	0.4837279381774695	T	T	T
0.7635835246323277	0.5622049331782641	0.5148466869430847	T	T	T

0.5528760131657091	0.4433179202012792	0.4045824026871406	T	T	T
0.4687597820830315	0.2779038717342027	0.5009380759916863	T	T	T
0.7569411830748233	0.5593242486908958	0.5750890751256843	T	T	T
0.8577958395590918	0.4943450354271064	0.4969611154956244	T	T	T
0.8396826889762868	0.7244243956124664	0.4964232637936984	T	T	T
0.4512751862057460	0.5088764783268598	0.5002712789711831	T	T	T

CH3CHOH\_to\_CH3CHO@Ni. Energy = -236.89455 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H

36 2 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218845787106929	0.1126274609973095	0.2226835969145995	F	F	F
0.5553695193295383	0.1126122427864260	0.2206836978418067	F	F	F
0.8893955388659620	0.1108848181042532	0.2226162839450794	F	F	F
0.2215031366153823	0.4429652580336736	0.2222095958315506	F	F	F
0.5515516401877321	0.4435504048285281	0.2223357024420309	F	F	F
0.8875599275915036	0.4459957673933133	0.2212570469979909	F	F	F
0.5539388084468015	0.7778241300029620	0.2212644041720822	F	F	F
0.8884728201859531	0.7803610789067932	0.2231742833260384	F	F	F
0.2199505722807373	0.7772922463154970	0.2213085187062234	F	F	F
0.9956676005495027	0.0018159135474747	0.3370083853418251	F	F	F
0.3340152256421618	0.9951644212889050	0.3306024919775439	F	F	F
0.6631578160380798	0.0002470204432896	0.3304089797856591	F	F	F



0.3282856653295028	0.3320195421598342	0.3410180701198442	F	F	F
0.6645943687361680	0.3346822320946998	0.3303532403614824	F	F	F
0.9959157945181403	0.3382471278865822	0.3297436966905209	F	F	F
0.3320741609362585	0.6659299492564372	0.3311949542026156	F	F	F
0.6607077975232016	0.6637908180271666	0.3308859131195589	F	F	F
0.0011153403046507	0.6699384087075018	0.3329999679785161	F	F	F
0.2469405860312598	0.2333870256896721	0.4439461535232648	T	T	T
0.4286557710986014	0.2619082841343768	0.4892632659512754	T	T	T
0.0832098468638257	0.0319706722134752	0.4416445343818329	T	T	T
0.5542005205068133	0.4241730002348515	0.4886337029917148	T	T	T
0.3764183443975663	0.2166929222521164	0.5464365433993870	T	T	T
0.4896534528574261	0.1631474529954953	0.4694063714433296	T	T	T
0.1884887810314811	0.3386570226793327	0.4593168717386176	T	T	T
0.1300154926081647	0.9087736228195245	0.3985379670955420	T	T	T

CH3CH2O\_to\_CH3CHO@Ni. Energy = -237.31469 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495283

Ni C O H

36 2 1 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333332728696163	0.3333332124058899	0.0000000000000000	F	F	F
0.666666062029449	0.3333332124058899	0.0000000000000000	F	F	F
0.999999395362806	0.3333332124058899	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333332124058899	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666665457392256	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.999998790725613	0.6666664248117868	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111113007303857	0.2222226014607713	0.1111113325119959	F	F	F
0.4444446340637214	0.2222226014607713	0.1111113325119959	F	F	F
0.777779673970571	0.2222226014607713	0.1111113325119959	F	F	F
0.4444445736000020	0.5555558138666683	0.1111113325119959	F	F	F
0.777779069333306	0.5555558138666683	0.1111113325119959	F	F	F
0.1111112402666663	0.5555558138666683	0.1111113325119959	F	F	F
0.4444445131362826	0.8888890262725582	0.1111113325119959	F	F	F
0.777778464696112	0.8888890262725582	0.1111113325119959	F	F	F
0.1111111798029469	0.8888890262725582	0.1111113325119959	F	F	F
0.2226770723845968	0.1097180039295185	0.2214280502056543	T	T	T
0.5563348499616919	0.1109244039004676	0.2211481269164983	T	T	T
0.8893255725537429	0.1114077241256240	0.2199157693829651	T	T	T
0.2218228749547705	0.4443142757441277	0.2192252089911170	T	T	T

0.5560408978910155	0.4439308889597972	0.2205511013724613	T	T	T
0.8865322584288619	0.4436936554497545	0.2216803052533657	T	T	T
0.5562888277626922	0.7797341645960638	0.2207988537482444	T	T	T
0.8891216001614851	0.7782527660589835	0.2202899257124712	T	T	T
0.2232348220195728	0.7807901818295295	0.2216492597042967	T	T	T
0.0010103494740097	0.9996934033071684	0.3301181096677417	T	T	T
0.3345870557975857	0.9991753743677536	0.3346668909566916	T	T	T
0.6720251661209103	0.9942008312679552	0.3328426107943269	T	T	T
0.3309151263754933	0.3372251746866291	0.3277984728979010	T	T	T
0.6660485657584205	0.3367759627990254	0.3332347397252843	T	T	T
0.0033668889040743	0.3348545621698489	0.3288100560518060	T	T	T
0.3298071121078708	0.6618999326817786	0.3280220764672341	T	T	T
0.6666158210500551	0.6639583497507781	0.3284275700466108	T	T	T
0.0009763807325110	0.6677777128319801	0.3293587829424965	T	T	T
0.6405399932605246	0.0626212879518674	0.4445184829400886	T	T	T
0.7911567863201716	0.1941442414007384	0.5037216003701708	T	T	T
0.5254234778892434	0.1465576594689816	0.4176994646166384	T	T	T
0.8224976840462154	0.0811034622126583	0.3986417177506085	T	T	T
0.5437860694867104	0.8985361872246465	0.4601226940299846	T	T	T
0.7020289027685321	0.2029366629808602	0.5503615525325519	T	T	T
0.8836007883336982	0.1253640187093414	0.5224513340127194	T	T	T
0.8960833988849591	0.3519313496384122	0.4835334699725586	T	T	T

CH3CHO@Ni. Energy = -233.98785 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C O H

36 2 1 4

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333432674408 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666865348816 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333432674408 0.3333333432674408 0.0000000000000000 F F F

0.6666666865348816 0.3333333432674408 0.0000000000000000 F F F

0.000000020031479 0.3333333432674408 0.0000000000000000 F F F

0.3333333432674408 0.6666666865348816 0.0000000000000000 F F F

0.6666666865348816 0.6666666865348816 0.0000000000000000 F F F

0.000000040063028 0.6666666865348816 0.0000000000000000 F F F

0.1111111119389534 0.222222238779068 0.1111111119389534 F F F

0.4444444477558136 0.222222238779068 0.1111111119389534 F F F

0.7777777910232544 0.222222238779068 0.1111111119389534 F F F

0.4444444477558136 0.5555555820465088 0.1111111119389534 F F F

0.7777777910232544 0.5555555820465088 0.1111111119389534 F F F

0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.2230385342067690	0.1118924222803545	0.2210774080016858	T	T	T
0.5531997389357129	0.1090366842694227	0.2214963936176896	T	T	T
0.8904273633723293	0.1092073935773224	0.2216051963598031	T	T	T
0.2227194483695759	0.4433721671361809	0.2204553096547808	T	T	T
0.5554133288177663	0.4438658008941220	0.2203594320535512	T	T	T
0.8891175644693610	0.4436988309758060	0.2194287583057031	T	T	T
0.5558959583980296	0.7773223766837947	0.2200990099963387	T	T	T
0.8902431937659531	0.7794679746549505	0.2211092534264003	T	T	T
0.2231794661356813	0.7787840442871266	0.2208237545624905	T	T	T
1.0016693542244515	1.0004297393011117	0.3345196289466871	T	T	T
0.3341134177798668	0.9986671992394490	0.3333602125255785	T	T	T
0.6677825572753249	0.9997528513809935	0.3291067474694154	T	T	T
0.3394318687994640	0.3439638273904400	0.3342149898438358	T	T	T
0.6698662030157059	0.3347356259540117	0.3281240697925282	T	T	T
0.9998274916933538	0.3347326632277918	0.3284161197904302	T	T	T
0.3354819211583179	0.6676844223111147	0.3286926461334811	T	T	T
0.6676645483502663	0.6678310382166410	0.3289223949559091	T	T	T
0.9971395901892471	0.6592837785649194	0.3277024892993650	T	T	T
0.2969881132417652	0.2422824041326147	0.4362890760424394	T	T	T
0.1835896764733547	0.3153818881983644	0.4850526430416177	T	T	T
0.1888062299400197	0.0348136676726502	0.4180184237418866	T	T	T
0.2731858575932519	0.4844300534799689	0.4914818508152273	T	T	T
0.0292000076008279	0.2716196446902488	0.4630153502074654	T	T	T
0.1621715478995270	0.2430617851398596	0.5396511395853484	T	T	T
0.4550783086504352	0.2895560906752570	0.4554740676402046	T	T	T

CH3CHNH@Ni. Energy = -239.5127 eV.

2.4843000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni N C H

36 1 2 5

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2237869242156667	0.1152421350707930	0.2217062403499978	T	T	T
0.5567186897832137	0.1122222298552537	0.2203405451869171	T	T	T
0.8892761505737211	0.1106473169942701	0.2199903063998281	T	T	T
0.2219473532403034	0.4438567599371198	0.2198587221691633	T	T	T
0.5533990401489548	0.4419719029977394	0.2214343137975539	T	T	T
0.8882449141058790	0.4433459211494227	0.2207873017805043	T	T	T
0.5555376699634592	0.7758130579287912	0.2208977003517502	T	T	T
0.8880122010567615	0.7770197131703462	0.2198728251705990	T	T	T
0.2235174980919329	0.7785627685799157	0.2195379823788823	T	T	T
0.9976327460945466	0.9968837076383535	0.3297012730324744	T	T	T
0.3346000472564351	0.0005327882204902	0.3284905456280527	T	T	T
0.6668891418639379	0.9960803251872316	0.3278159159319016	T	T	T
0.3350951698953301	0.3372108535017961	0.3451055875713323	T	T	T
0.6725715064913815	0.3285170545579565	0.3330977598237699	T	T	T
0.9929149973957303	0.3249765859872946	0.3314228891273063	T	T	T
0.3354090531318603	0.6744371919794742	0.3320135744643198	T	T	T
0.6707835245466404	0.6669725385513854	0.3315170896284769	T	T	T
0.0043855321610926	0.6705472400890431	0.3287931728469828	T	T	T
0.2057216612129496	0.4561795327711543	0.3950263575929872	T	T	T
0.5678039868776730	0.4370167105578022	0.4086110752003022	T	T	T
0.6261602581889173	0.3044942496279601	0.4438215748770800	T	T	T
0.5118297009448005	0.1430547781790600	0.4558917340297000	T	T	T
0.7631963444680538	0.3713219632442720	0.4792711817427660	T	T	T
0.1143129651796994	0.8915940618528994	0.3794599856089064	T	T	T
0.6423294490039213	0.6015118718052015	0.4310504380071529	T	T	T
0.2019766869242106	0.4667718177710931	0.4509811646559021	T	T	T

CH3CHNH\_to\_CH3CHNH2@Ni. Energy = -242.20899 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111107	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2232802063806340	0.1123382822701214	0.2203753291503765	T	T	T
0.5566184596226351	0.1139989679017088	0.2211860049721356	T	T	T
0.8895194550813318	0.1109649627478023	0.2200659596635798	T	T	T
0.2228985314949129	0.4419767364894379	0.2211984989152864	T	T	T
0.5558167225425170	0.4440873925403486	0.2211292291797132	T	T	T
0.8857084962992694	0.4426893651275466	0.2215235416547247	T	T	T
0.5551265365251301	0.7778224985297011	0.2198032079969684	T	T	T
0.8898179643753331	0.7781777516537765	0.2199441596477623	T	T	T
0.2212697239990624	0.7766005929239699	0.2196792934890996	T	T	T
1.0025511621210443	0.0023541567728745	0.3313176326448261	T	T	T
0.3303766829775245	0.9919848986915982	0.3277305354587350	T	T	T
0.6686472325094330	0.9999008352449456	0.3282474098214954	T	T	T
0.3362491782977223	0.3337708960249217	0.3347528230759643	T	T	T
0.6620371859535672	0.3328112621899421	0.3388035716091931	T	T	T
0.9959451323293190	0.3333252878859412	0.3287010724925720	T	T	T
0.3330424249539323	0.6669128796876561	0.3278725555352172	T	T	T
0.6710600142220694	0.6730441817906512	0.3275191165433962	T	T	T
0.9984056552164656	0.6652068492441301	0.3290470756097444	T	T	T
0.5615091347493780	0.3141076392487011	0.4436197052831851	T	T	T
0.5410691549329254	0.1221490588727916	0.4800732100671841	T	T	T
0.3777767936395768	0.3220732625175455	0.4419140628193635	T	T	T
0.3947280395578028	0.4645872182212086	0.4538061755853382	T	T	T
0.6959504841135742	0.4598499233651054	0.4628469890690675	T	T	T
0.1946574560159873	0.1612237483226318	0.3973820619006437	T	T	T
0.5169571184366050	0.1302486631471062	0.5395008832511077	T	T	T
0.4056007015295682	0.9801068904485594	0.4589735629060844	T	T	T
0.6800804692288961	0.1088022929915331	0.4719872085590229	T	T	T

CH3CHNH\_to\_CH3CH2NH@Ni. Energy = -242.83535 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111058	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2227660414374773	0.1109265865412984	0.2201586189170241	T	T	T
0.5543729074026725	0.1106918098011111	0.2197822977271443	T	T	T
0.8896787194562903	0.1109770383531036	0.2196755200389998	T	T	T
0.2244606601053792	0.4438268356508770	0.2215601571075615	T	T	T
0.5554397671330146	0.4451823128818211	0.2202739039056269	T	T	T
0.8893581399644168	0.4450684953847855	0.2197874130639262	T	T	T
0.5545723524084274	0.7760676932512747	0.2205884223898446	T	T	T
0.8866679242001103	0.7754988355559023	0.2213818065210672	T	T	T
0.2243471061364921	0.7761723791770323	0.2223313876678461	T	T	T
0.9986066619843674	0.9988689787748232	0.3280607851902350	T	T	T
0.3340778992673741	0.0012155827847280	0.3306709727487330	T	T	T
0.6706805512952065	0.0073734669020863	0.3273559789073186	T	T	T
0.3298508521533897	0.3265253294205724	0.3334877610487721	T	T	T
0.6710026136470102	0.3334671864471916	0.3279531530460502	T	T	T
0.9959245291822543	0.3335634141452630	0.3278666942045997	T	T	T
0.3352242030489740	0.6691023164191976	0.3356351293238031	T	T	T
0.6705257599624977	0.6722221159756511	0.3336833713119701	T	T	T
0.0013470966630090	0.6675653803803739	0.3293052296047875	T	T	T

0.3902342713937335 0.4112783310372105 0.4433235444362379 T T T  
0.1940861471744191 0.3353118843886094 0.4876867105496259 T T T  
0.4796010090517505 0.6183627714620514 0.4133198500250270 T T T  
0.5382304566251875 0.7316722798518556 0.4529663436833747 T T T  
0.5084122511214375 0.3965967530055039 0.4749099377390700 T T T  
0.3799953734774281 0.2284193136269412 0.3984463768497348 T T T  
0.2286094056395788 0.4261446359657412 0.5388242840343674 T T T  
0.0763815912816783 0.3530515320312414 0.4569648028340115 T T T  
0.1285187617339809 0.1710935910890323 0.5021691752709144 T T T

CH3CHNH2@Ni. Energy = -243.42841 eV.

2.48430000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000  
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000  
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H  
36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F  
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F  
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F  
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F  
0.2217105481204107 0.1114786040127290 0.2199055697741081 T T T  
0.5567791236630848 0.1139880917049553 0.2210912372899969 T T T  
0.8895979369186364 0.1144377023033141 0.2211820964611828 T T T  
0.2190220558232593 0.4431124777286591 0.2212760854387657 T T T  
0.5559484639618756 0.4423424512675343 0.2218624788304897 T T T  
0.8876194352590959 0.4431685155728769 0.2215288187857073 T T T  
0.5545894851056945 0.7774163619355312 0.2196130975113629 T T T  
0.8876795679341175 0.7778789120062851 0.2198714872316291 T T T  
0.2224812571366865 0.7779857687053675 0.2197072733728394 T T T

-0.0006567749994566	0.0006038262879958	0.3287131044063134	T	T	T
0.3303729681243728	-0.0003702348236104	0.3283294191853308	T	T	T
0.6629842332073533	0.9947093160369400	0.3275602854013099	T	T	T
0.3294420496389184	0.3332709389934360	0.3289636610560633	T	T	T
0.6655377727987789	0.3341971470585137	0.3364840695328297	T	T	T
-0.0039376089704687	0.3342782755475620	0.3384952924456789	T	T	T
0.3324350440059058	0.6667799581559711	0.3287406114920937	T	T	T
0.6648141484640158	0.6688456922211814	0.3284096844970417	T	T	T
0.0021491081273529	0.6731401022034966	0.3272811370382676	T	T	T
0.9314157249674443	0.3530589794351301	0.4415392622777080	T	T	T
0.9404795490867258	0.1936232694410242	0.4905182958105936	T	T	T
0.7260639557511553	0.3365123193269225	0.4421825134584565	T	T	T
0.0930776388262410	0.2055074226083331	0.4865529915088005	T	T	T
0.9126311931570059	0.2175751212690222	0.5483559529134645	T	T	T
0.8241061887234191	0.0348698288100026	0.4741946080890937	T	T	T
0.0471236426465436	0.5120251271934643	0.4574253103755715	T	T	T
0.7246586878590046	0.4596928580317410	0.4664981704147627	T	T	T
0.6144027156719929	0.2009011559902206	0.4652496300881982	T	T	T

CH3CH2NH@Ni. Energy = -243.56724 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H

36 2 1 6

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F

0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F

0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F

0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F

0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F



0.2226460863741712	0.1113319337936255	0.2209608887856339	T	T	T
0.5529190675463304	0.1101873271180124	0.2207235715624125	T	T	T
0.8881365349377508	0.1120123948941113	0.2196560506270538	T	T	T
0.2244558110551322	0.4436817283108018	0.2219503675092778	T	T	T
0.5532512303549115	0.4430877093609765	0.2206044085052584	T	T	T
0.8895766806479070	0.4449514874038892	0.2197505441438548	T	T	T
0.5546457780295626	0.7774298455088943	0.2199158119615912	T	T	T
0.8881882120766699	0.7762261677753259	0.2196429570056154	T	T	T
0.2245501023512841	0.7810034159717316	0.2221769621926375	T	T	T
0.9881066280977029	0.9940981818165251	0.3266120570460109	T	T	T
0.3298150143204567	0.9995631233726264	0.3366511037666819	T	T	T
0.6640108759696624	0.9974494315448019	0.3285109575718714	T	T	T
0.3298196789131650	0.3308031705000691	0.3359428484747085	T	T	T
0.6735759090566180	0.3367355075303814	0.3274040513394968	T	T	T
0.9984179825288818	0.3327818416508249	0.3288043078282403	T	T	T
0.3318946797152051	0.6660082497556703	0.3298000444811883	T	T	T
0.6640713678226676	0.6664878504668582	0.3284406326428047	T	T	T
0.9985169786974591	0.6658160636936307	0.3289519011356352	T	T	T
0.4983739845615625	0.2547712681819084	0.4733547465226319	T	T	T
0.4932353979904296	0.4237367382686924	0.5182822467556691	T	T	T
0.3337462763425492	0.1679351248028522	0.4174134457843513	T	T	T
0.6508396164426421	0.3181445007141634	0.4454158111314258	T	T	T
0.4832398690997566	0.1278679294151216	0.5088124536324868	T	T	T
0.1935162564593906	0.1000354792803419	0.4441375409513172	T	T	T
0.3417937701444075	0.3648586708298781	0.5451644942791948	T	T	T
0.5193914101331067	0.5534418835893865	0.4823877306111685	T	T	T
0.6133881164097928	0.4813035774443959	0.5609932529712671	T	T	T

CH3CHNH2\_to\_CH3CH2NH2@Ni. Energy = -246.56907 eV.

2.484300000000000

3.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000
-1.500000000000000	2.5980762113533160	0.000000000000000
0.000000000000000	0.000000000000000	7.3484692283495345

Ni C N H  
36 2 1 7

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F

0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.2222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111058	0.8888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2238507299174460	0.1132146880098098	0.2209092340724302	T	T	T
0.5576093466615218	0.1155716522830973	0.2220281087184130	T	T	T
0.8887586128780814	0.1107184118249687	0.2198551240386296	T	T	T
0.2235916657989623	0.4424244766996991	0.2215947107874328	T	T	T
0.5550932216923397	0.4436143853759691	0.2212041609338806	T	T	T
0.8872507629447541	0.4432325705777603	0.2211230048983067	T	T	T
0.5549512957839314	0.7774571795370293	0.2197676595057133	T	T	T
0.8900886360011984	0.7774185174787868	0.2196924073306078	T	T	T
0.2212795141360733	0.7762155080375756	0.2195998095653451	T	T	T
0.9991363162295586	0.9991868803484498	0.3284918338697433	T	T	T
0.3290469874388229	0.9917588229810121	0.3272088294990601	T	T	T
0.6663189231988896	0.9972516180669685	0.3284595021135992	T	T	T
0.332038882340199	0.3319144859903069	0.3356040158932174	T	T	T
0.6646689558979535	0.3311964829503770	0.3374910153792471	T	T	T
0.9993984978102869	0.3306980175073464	0.3283928770453398	T	T	T
0.3327689530648832	0.6668679045969552	0.3286037918867649	T	T	T
0.6702819300463576	0.6739960043366238	0.3272891798875190	T	T	T
0.9997916243390541	0.6658579188758372	0.3302404178884679	T	T	T
0.6128698595414050	0.3760320314185377	0.4515170485637914	T	T	T
0.6355787445249679	0.2106251601808057	0.4916325461015532	T	T	T
0.3967238348717916	0.3271011980228508	0.4421996108728803	T	T	T
0.6945877001092924	0.5226424142009134	0.4821257881065847	T	T	T
0.3638701782124298	0.4268691970616499	0.4698533440978392	T	T	T
0.2952587170842292	0.1778138165225548	0.4581742160473915	T	T	T
0.7648981812009594	0.5100118464655469	0.3946375883546400	T	T	T
0.5908836215945703	0.2041644164145254	0.5497720169116033	T	T	T
0.5390417719583103	0.0573938860464881	0.4663341847534661	T	T	T
0.7969429029914028	0.2448941423543559	0.4891532671322865	T	T	T

CH3CH2NH\_to\_CH3CH2NH2@Ni. Energy = -246.18032 eV.

2.484300000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H

36 2 1 7

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111058	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2228470713378650	0.1104475031231264	0.2208676437952650	T	T	T
0.5527920770847567	0.1103887606063302	0.2213649256548057	T	T	T
0.8885054446174059	0.1122406558182170	0.2196206748147607	T	T	T
0.2241828004044151	0.4447128655799993	0.2209833457671818	T	T	T
0.5555036673789395	0.4446813878606463	0.2197419353787735	T	T	T
0.8895541140302667	0.4455942995017770	0.2195794171216546	T	T	T
0.5555317434764209	0.7777086126945618	0.2203434250448799	T	T	T
0.8880182359511343	0.7764957138966982	0.2198313416261994	T	T	T
0.2245705146269503	0.7822427107911571	0.2225759919901846	T	T	T
0.9905589115998399	0.9954177619857884	0.3267362716097271	T	T	T
0.3290896227977423	0.9957600498536929	0.3386766365868428	T	T	T
0.6659250285326128	0.9971845901227390	0.3284449355840801	T	T	T
0.3314033563759305	0.3367318056279024	0.3307273839311765	T	T	T
0.6728826316637213	0.3383097480565343	0.3282311777468349	T	T	T
0.9983913507634097	0.3329429420173178	0.3282474909099098	T	T	T
0.3319969243944909	0.6672226083063838	0.3296803376749147	T	T	T
0.6650827310578200	0.6649433566435651	0.3307736236258441	T	T	T
0.9987041071161125	0.6657750677643072	0.3291631520240865	T	T	T
0.4556045184991827	0.1679982020775527	0.4977908583822848	T	T	T
0.6616200748889327	0.1760740392101028	0.4918243185201685	T	T	T
0.3553913831426485	0.1562320809233158	0.4264495479460816	T	T	T
0.3453941128346173	0.0298695894885398	0.5292045237871983	T	T	T
0.5032898293128434	0.3667216058964012	0.3933742753406141	T	T	T
0.2164180769953498	0.1495533377534091	0.4377599460631268	T	T	T
0.4744115393104658	0.3048900895622714	0.5278647245926064	T	T	T
0.7268227367630278	0.1851676064409593	0.5466881304416810	T	T	T
0.6446329394370444	0.0369875846397218	0.4639260716911361	T	T	T

0.7739089134405307 0.3130144915880881 0.4602459480788867 T T T

CH3CH2NH2@Ni. Energy = -247.53183 eV.

2.484300000000000

3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000

-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000

0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495345

Ni C N H

36 2 1 7

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.2222222222222214	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.2222222222222214	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.2222222222222214	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.2222222222222214	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.2222222222222214	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.2222222222222214	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.2222222222222214	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.2222222222222214	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.2222222222222214	F	F	F
-0.0027606518973719	-0.0024293476017000	0.3296672153765240	T	T	T
0.3332184660293773	-0.0018164700753520	0.3302589333698546	T	T	T
0.6666706290754909	0.0002088860169353	0.3311304215575307	T	T	T
0.3338968550538735	0.3341545130499871	0.3397971061912237	T	T	T
0.6680161905602612	0.3326981275466749	0.3298672583725933	T	T	T
-0.0028559913612139	0.3330839289284390	0.3299149201802609	T	T	T
0.3332959923723272	0.6690210512933397	0.3301900565494836	T	T	T
0.6680115666485271	0.6686080546903154	0.3304271451790378	T	T	T

0.0000763317435123 0.6667265718964035 0.3310440883183753 T T T  
0.4649504306948806 0.3275723760486862 0.5005218700910169 T T T  
0.6428000309679609 0.5467981638542335 0.5099304986684492 T T T  
0.3030116216110542 0.3199917636563182 0.4508546904334187 T T T  
0.5190721779436356 0.2277771054860639 0.4761846358894917 T T T  
0.3945713480910395 0.2616490576530853 0.5541597162918325 T T T  
0.2695114604992144 0.4333862721249179 0.4652003958713499 T T T  
0.1676261787993419 0.1813747715239960 0.4571580931908311 T T T  
0.5896075988001291 0.6490118603572200 0.5326972330525730 T T T  
0.7190043801709162 0.6116970655588261 0.4567257191146465 T T T  
0.7599541076412960 0.5491130475930454 0.5471008361495531 T T T

## REFERENCES

- [1] J. T. Scanlon, D. E. Willis, *J. Chromatogr. Sci.* **1985**, *23*, 333-340.
- [2] M. E. Crivello, C. F. Pérez, S. N. Mendieta, S. G. Casuscelli, G. A. Eimer, V. R. Elías, E. R. Herrero, *Catal. Today* **2008**, *133-135*, 787-792.
- [3] Y. H. Hu, E. Ruckenstein, *J. Catal.* **1996**, *163*, 306-311.
- [4] D. C. R. M. Santos, J. S. Lisboa, F. B. Passos, F. B. Noronha, *Brazilian J. Chem. Eng.* **2004**, *21*, 203-209.